

Universidad Carlos III de Madrid



DEPARTAMENTO DE CIENCIA E
INGENIERÍA DE MATERIALES E
INGENIERÍA QUÍMICA

Grupo de Modelización, Simulación y Matemática
Industrial

– Tesis Doctoral –

*Estudio numérico y asintótico de
modelos discretos
en Física de semiconductores*

Guido Dell'Acqua

– Febrero 2007 –

DIRECTOR

Luis L. Bonilla

A Davide

Agradecimientos

Muchas son las personas que aquí querría agradecer, así que casi me parece faltar el respecto de los que no puedo, por razón de espacio, nombrar en estas líneas.

Mi gratitud mayor va, sin duda, al director de esta tesis, Luis Lopez Bonilla, por el apoyo, la dedicación y todo lo que he aprendido de él en estos años, años en que me ha esperado con paciencia.

Agradezco igualmente a Ramón Escobedo, verdadero hermano en esta aventura, la paciencia y el apoyo constante, tanto en España como en Italia. Gracias brodel!

Luego agradezco mucho a los profesores del Programa de Ingeniería Matemática, Manuel Kindelán y Immaculada Iglesias Estradé que me han iniciado al cálculo numérico, Marcela Molina, Alberto Ibort, Maria Angeles Hernandez, Antonio Sánchez, Stephen W. Teitsworth, José Gambi, José Jiménez Sendín, Antonio Marquina, Juan Bosco García-Archilla, Vincenzo Capasso.

De los muy numerosos amigos y compañeros que tuve la suerte de encontrar en mis años en tierra de España, quiero aquí nombrar a Juan Antonio Acebrón, Gerardo Oleaga, Álvaro Perales, Pedro J. Hernando, Roberto Costas, Ignacio Arana.

También quiero agradecer a los profesores Miguel Angel Moscoso y Holger T. Grahm por las fructíferas discusiones y las sugerencias.

Así como quiero expresar mi agradecimiento a los miembros del Tribunal por haber accedido a formar parte del mismo.

Agradezco también a Romina Andreani la corrección final del castellano.

Finalmente, agradezco a mi mujer Alessandra por haberme aguantado en estos años y especialmente en los meses de redacción de esta tesis.

Índice general

1. Introducción	9
2. Conceptos generales	13
2.1. Superredes semiconductoras	13
2.2. El modelo de Kronig-Penney	14
2.3. Modelo de Esaki-Tsu: comportamiento dinámico	16
2.4. Superredes fuertemente y débilmente acopladas	18
3. El modelo matemático discreto de convección-difusión	21
3.1. Introducción	21
3.2. Características generales	21
3.3. Escalas temporales	22
3.4. Parámetros físicos	22
3.5. La corriente túnel	23
3.6. Ecuaciones	24
3.7. Adimensionalización	26
4. Característica corriente-voltaje e inestabilidades de la corriente	29
4.1. Introducción	29
4.2. Estados estacionarios	31
4.3. Estabilidad lineal	33
4.4. Ecuación de amplitud	35
4.4.1. Condición de no-resonancia	35
4.4.2. Bifurcación de Hopf	37
4.5. Conclusiones	42
5. Estudio numérico del modelo y de la dinámica de recolocación debida a sweeping del voltaje	43
5.1. Introducción	43

5.2. El método numérico	44
5.2.1. Euler explícito	45
5.2.2. BDF-1: Euler implícito	45
5.2.3. BDF-2, 3 y 4	46
5.2.4. Detalles del algoritmo	46
5.2.5. Sobre el rendimiento de los BDF	48
5.3. Sweeping largo: evolución de $J(V)$ a lo largo de la curva I-V	49
5.3.1. Sweeping partiendo de ramas biestables: escenario de dipolo-tripolo modificado	50
5.3.2. Mismo rango de sweeping para ramas biestables y triestables	54
5.4. Sweeping del voltaje a V_f cerca de la extremidad superior de las ramas . . .	54
5.4.1. Valores altos del voltaje cerca del final del plateau	54
5.4.2. Sweeping del voltaje a valores bajos cerca de las extremidades su- periores de las ramas	56
5.5. Conclusiones	60
6. Movimiento de frentes de onda en superredes semiconductoras	63
6.1. Introducción	63
6.2. Planteamiento del problema	66
6.3. Plano de la estabilidad	67
6.4. Anclaje de frentes de onda con un solo pozo activo	70
6.5. Anclaje de frentes de onda con más pozos activos	74
6.6. El límite continuo	77
6.7. Conclusiones	79
7. Conclusiones y problemas abiertos	81
A. Velocidad de convección y coeficiente de difusión	83
B. Corrección del primer orden a la regla de áreas iguales	85

Capítulo 1

Introducción

Esta tesis presenta el estudio y el desarrollo de modelos de transporte de carga eléctrica en *superredes semiconductoras* (SL, de *superlattice*), cuya estructura física y principales características se tratan en el capítulo siguiente. Las *superredes semiconductoras* son sistemas fuertemente no lineales casi-unidimensionales, formados por una sucesión de barreras y pozos de potencial, y cuya riqueza radica en la gran variedad de patrones y comportamientos distintos que se encuentran variando los parámetros físicos involucrados.

En la presente tesis nos basaremos en la superredes *débilmente acopladas*, con lo que ya fijamos unas determinadas características de nuestros sistemas, como veremos más adelante. A continuación, hacemos un resumen del contenido de la tesis.

En el Capítulo 2 tratamos las superredes desde un punto de vista general. Introducimos los conceptos necesarios para comprender su funcionamiento y la configuración estacionaria que los electrones adoptan en ellas, mediante el concepto de minibanda y el modelo de Kronig-Penney. Después, abordamos el comportamiento dinámico de las superredes con la descripción del modelo de Esaki y Tsu, sencillo pero genial, e introducimos también el concepto de *conductancia diferencial negativa*. Finalmente, describimos qué son las superredes fuertemente y débilmente acopladas. El grado de acoplamiento entre pozos vecinos, dependiente del tamaño de las barreras, determina junto con el campo el tipo de transporte. Así, en superredes fuertemente acopladas el transporte se realiza principalmente por minibanda, mientras que para superredes débilmente acopladas el mecanismo predominante es el túnel resonante secuencial. Por último, detallamos más el concepto de *conductancia diferencial negativa*, importante manifestación que tiene como consecuencia la aparición de inestabilidades en la corriente.

En el Capítulo 3 repasamos el modelo más importante para superredes débilmente acopladas propuesto en 1994 por L. L. Bonilla *et al.* [6] en el que el mecanismo de túnel resonante secuencial es el principal responsable del transporte de carga. Se explican las aproximaciones necesarias para su formulación, en particular, la separación de las escalas

temporales a las que ocurren los diferentes fenómenos físicos relacionados con el transporte; lo que permite derivar un modelo *discreto*, con ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, cuyo número viene determinado por el número de periodos de la superred, y que representan la continuidad de carga y la ecuación de Poisson en cada pozo de la superred. Los fenómenos cuánticos se introducen a través de la densidad de corriente túnel, que evalúa las probabilidades de transición túnel entre niveles energéticos de pozos vecinos en función del campo eléctrico presente. Según consideremos como parámetro del sistema la corriente total o el voltaje aplicado, obtendremos dos variantes del modelo, que vamos a estudiar en los capítulos siguientes. Después de presentar los valores típicos de variables y parámetros, se utilizan las escalas adecuadas para adimensionalizar el modelo. Así, se logra que todas las variables sean de orden unidad y se facilita la resolución del mismo con sus variantes.

En el Capítulo 4 estudiamos los estados estacionarios del sistema para voltaje constante. Después de construir numéricamente la curva característica I–V, elaboramos un análisis de estabilidad lineal de las ramas estacionarias. Este análisis presenta la posible existencia de puntos de bifurcación de Hopf cerca de las extremidades superiores de las ramas estacionarias. Después, se hace un desarrollo en escalas múltiples para encontrar la ecuación de amplitud y los puntos de bifurcación.

El Capítulo 5 comienza con una descripción de los métodos numéricos utilizados para resolver numéricamente el modelo y mediante los cuales hemos podido caracterizar numéricamente la respuesta del sistema a diferentes manipulaciones del voltaje aplicado (*sweeping*). El resultado principal es la descripción detallada de diversos nuevos escenarios de recolocación de los dominios del campo eléctrico y la respuesta de la densidad de corriente, que añaden nuevas fenomenologías a las ya conocidas en la literatura. De hecho, encontramos oscilaciones auto-sostenidas de la densidad de corriente cerca de las extremidades de las ramas estacionarias estables de la curva característica I–V debidas al reciclaje periódico de dipolos de carga cerca del cátodo que desaparecen dentro de la superred, antes de que puedan alcanzar el ánodo. También investigamos la dependencia de la respuesta dinámica del sistema del número de ramas multi-estables de la característica I–V, de su extensión y del tiempo de *ramping* (i.e. el tiempo necesario para pasar de un voltaje V_i a otro V_f). Vamos a encontrar dos valores críticos del tiempo de ramping, τ_{c1} y τ_{c2} , cuyos valores dependen de los parámetros de la superred, que seleccionan el escenario de relocación para los dominios del campo eléctrico así como el comportamiento de la corriente durante el *sweeping*. Nuestro trabajo añade nuevos escenarios a los que ya se habían encontrado en [1].

En el Capítulo 6 analizamos el modelo a corriente constante. En estas circunstancias, la naturaleza discreta del sistema se manifiesta: aparece el característico fenómeno de anclaje de los frentes de onda cuando el parámetro de control (la corriente) está en un determinado intervalo, fenómeno típico de los sistemas discretos, no compartido con los sistemas continuos. El dopaje adimensional ν tiene el papel de parámetro de control: el límite continuo se alcanza cuando $\nu \rightarrow 0$. En este capítulo también introducimos la noción de *pozo activo*, y con una análisis asintótica conseguimos describir la dinámica de los frentes de onda cerca de las corrientes críticas con unas ecuaciones reducidas. Nuestra descripción empeora cuando el dopaje decrece y nos acercamos al límite continuo. En realidad, en este caso vamos a necesitar más pozos activos para obtener una descripción adecuada. Finalmente, veremos que si el dopaje adimensional ν es suficientemente pequeño, y entonces estamos en el límite del continuo, las ecuaciones del modelo se pueden aproximar por una ecuación hiperbólica de primer orden, y los frentes de onda del modelo discreto son ondas de choque de la misma cuya velocidad obedece a una expresión del tipo igualdad de áreas.

Como conclusión, en el Capítulo 7 resumimos los contenidos esenciales de la tesis y presentamos las conclusiones generales, así como una descripción de los que, a nuestro entender, son los principales problemas abiertos y los futuros trabajos que se podrían seguir a partir de ella.

En las Apéndices A y B detallamos la aproximación analítica de la velocidad y de la difusión utilizadas en el Capítulo 6, y los cálculos necesarios para una corrección del primer orden de la regla de áreas iguales.

Capítulo 2

Conceptos generales

2.1. Superredes semiconductoras

Muchos años han pasado desde que Esaki y Tsu hicieron las primeras observaciones teóricas sobre los peculiares fenómenos, en regímenes de transporte de carga, que se hubieran podido ver en materiales cuya realización práctica todavía iba a tardar décadas. Esos materiales se llaman *superredes semiconductoras* y están hechos de dos materiales semiconductores. Un *semiconductor* se puede describir como un material cuyo portamiento está en el medio entre conductores y aislantes, es decir, bajo ciertas condiciones conduce la corriente eléctrica y bajo otras no la conduce.

Detallamos más. En general, los sólidos se clasifican según la ordenación de sus átomos en sólidos amorfos, cristalinos o policristalinos. Los sólidos cristalinos se pueden clasificar según su resistividad, que es una medida de la resistencia al pasaje de la corriente eléctrica. Si la resistividad es muy pequeña, el material es un metal y se suele decir que es un *conductor* (como el hierro). Si en cambio la resistividad es muy grande, el material es un *aislante* (como la cerámica). Pero existe también otro tipo de material cuya resistividad está entre las dos sobredichas y que depende también de otros factores, como la temperatura, la iluminación o la presencia de impurezas. Son los *semiconductores*.

La propiedad de no conducir/conducir la corriente eléctrica hace los materiales semiconductores ideales para las aplicaciones donde es importante tener dos estados, 0 y 1, o sea el así llamado *bit*. En general los dispositivos microelectrónicos se realizan con materiales semiconductores como el Germanio o el Silicio, elementos situados en la columna IV de la clasificación periódica de los elementos, pero se pueden también obtener semiconductores uniendo elementos simétricos respecto a la columna IV para formar elementos compuestos de tipo III-V como el Arseniuro de Galio (GaAs) y el Arseniuro de Aluminio (AlAs), o de tipo II-VI como el Telurio de Zinc. De todos estos, lo más importantes (y más utilizados) son el Silicio, el Germanio (con lo cual se hizo el primer transistor) y el

Arseniuro de Galio. Este último tiene la desventaja de no encontrarse en la naturaleza y su fabricación es entonces bastante cara (además de ser el Arsenio tóxico).

Ahora, ¿qué es una superred? Como ya hemos dicho, es una heteroestructura en la cual los dos materiales que la forman (GaAs y AlAs, por ejemplo) tienen un *gap* distinto (el *gap* de un semiconductor mide la cantidad de energía mínima necesaria para que un electrón pase de la banda de valencia a la banda de conducción). Cuando se crecen capas alternas de ambos materiales se forman pozos de energía en el material con *gap* menor (GaAs), rodeados de barreras formadas por el de *gap* mayor (AlAs). Si la dimensión de cada capa es de pocos nm los fenómenos físicos que tienen lugar están gobernados por las leyes de la mecánica cuántica.

Lo que movió a Esaki y Tsu a idear una superred fue lograr una estructura periódica a semejanza de la de un cristal natural, pero de período mayor, de manera que se pudieran medir macroscópicamente fenómenos cuánticos difícilmente medibles en los cristales naturales (p.e. las oscilaciones Bloch).

Desde que es posible construir superredes como las habían imaginadas Esaki y Tsu, se han convertido en un campo muy activo dentro de la física de semiconductores: aparte de su interés tecnológico como generadores sintonizables de alta frecuencia, ó como láseres, son un laboratorio muy apropiado para investigar multitud de fenómenos cuánticos, y, sobre todo, en su estudio se derivan modelos de gran interés matemático.

2.2. El modelo de Kronig-Penney

Este modelo, también llamado modelo de bandas de energía, consiste en suponer que los electrones libres del cristal están sometidos a un potencial periódico cuadrado unidimensional $V(x)$, definido como

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } 2i a \leq x < (2i + 1) a, \\ 0 & \text{si } (2i + 1) a \leq x < 2(i + 1) a, \end{cases} \quad \text{para } i = 0, 1, 2, \dots$$

La evolución de cada uno de estos electrones libres viene dada por su función de onda $\psi(x, t)$ mediante la ecuación de Schrödinger con potencial $V(x)$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t).$$

Separando variables de la forma $\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, se obtiene la ecuación de Schrödinger estacionaria:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = [E - V(x)] \psi(x).$$

Como $V(x)$ es un potencial periódico, podemos resolver esta ecuación aplicando el Teorema de Bloch, donde $\psi(x) = e^{ikx}u_k(x)$ y $u_k(x) = u_k(x+a)$. El resultado que se obtiene es una relación entre el período del potencial a y los parámetros E y k , que son los valores de la energía y el número de onda del electrón respectivamente. Esta relación es de la forma

$$\cos(ak) = f(E) \quad (2.2.1)$$

y la hemos esquematizado en la Figura 2.1(a). Cuando $|f(E)| \leq 1$ la relación (2.2.1) tiene solución para cualquier valor real de a . Son los *valores permitidos* de la energía o *bandas de energía permitida*. Cuando $|f(E)|$ es mayor a 1 no existe solución porque a debería ser complejo. Los valores de E correspondientes a este caso forman las *bandas de energía prohibida*, que generalmente reciben el nombre de *gap* de energía. Estas bandas de energía

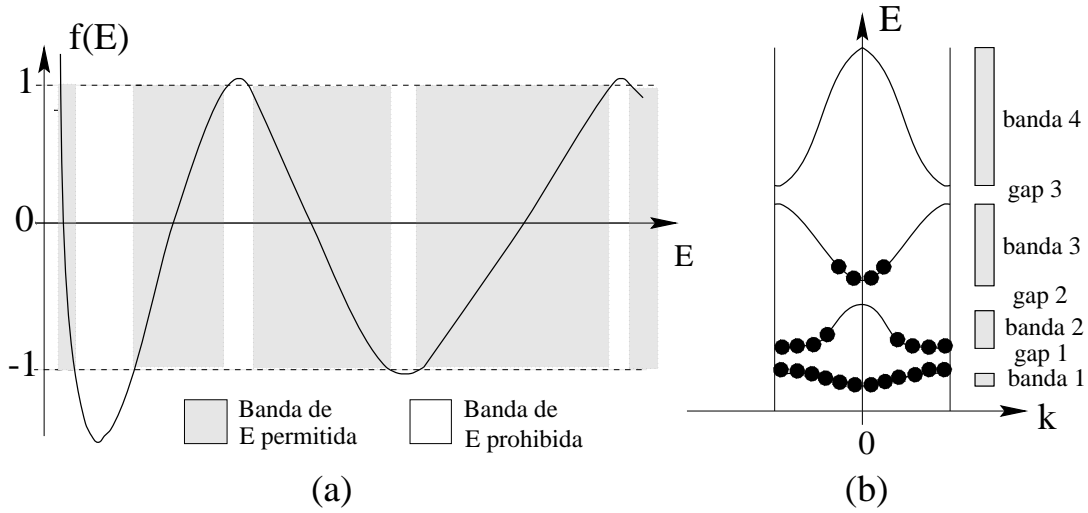


Figura 2.1: (a) Gráfica de la función $f(E)$ e intervalos (sombreados) de E en los que $f(E)$ está en el intervalo $[-1, 1]$. (b) Diagrama de bandas: 1^{era} zona de Brillouin. Nótese que a medida que E crece, las bandas son cada vez más anchas y los gaps cada vez más estrechos (de [19]).

se suelen representar en un sistema de coordenadas (O, k, E) en el que los intervalos de energía se disponen verticalmente centrado el período en $k = 0$ (1^{era} zona de Brillouin). Esta representación recibe el nombre de diagrama de bandas de energía o *diagrama E - k* . Véase la Figura 2.1(b). Los valores de E son simétricos respecto del eje $k = 0$ porque la función coseno es par; si (k, E) es solución de (2.2.1), también lo es $(-k, E)$.

A temperatura cero y en ausencia de agentes exteriores que puedan producir una corriente, los electrones ocupan los valores permitidos más bajos de la energía. Así, van rellenando las bandas permitidas más bajas hasta asumir la energía total del material. Cuando la última banda no es lo suficientemente alta, algunos electrones deben situarse en la banda permitida siguiente, como ocurre en el caso representado en la Figura 2.1(b) en las

bandas 2 y 3. La última banda casi completa recibe el nombre de *banda de valencia* (banda 2, a la cual le faltan cuatro electrones, o que tiene cuatro huecos). La banda permitida siguiente es la banda de *conducción* (banda 3, que tiene cuatro electrones que pueden desplazarse y *conducir* una corriente eléctrica). Estas dos bandas de energía permitida están separadas por un gap de energía prohibida (gap 2). Este gap es la barrera que tienen que saltar los electrones para poder desplazarse por el cristal y producir una corriente eléctrica y determina la resistividad de un material. Es el parámetro más importante de un material para los ingenieros y fabricantes de dispositivos microelectrónicos.

En un material aislante el gap es muy grande (5 eV), y a temperatura ambiente ($300^\circ K$) muy pocos electrones consiguen saltar de la banda de valencia a la de conducción. En los metales estas bandas están muy próximas o incluso solapadas –no hay gap– y los electrones no necesitan ganar energía para pasar a la banda de conducción. Por eso los metales son excelentes conductores. En los semiconductores el gap es intermedio (1.12 eV para el Si, 1.42 eV para el GaAs), de manera que a temperaturas bajas los electrones de la banda de valencia no ganan suficiente energía como para saltar el gap, mientras que a temperaturas suficientemente altas (temperatura ambiente) pueden conseguirlo. De ahí que los semiconductores den lugar a un transporte de carga entre pobre y excelente.

El diagrama de bandas de un material permite además evaluar una magnitud importante de un portador de carga: la *masa efectiva* m^* , definida por

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}.$$

Esta magnitud es proporcional a la curvatura de $E(k)$ y generalmente puede estimarse a simple vista en el diagrama. En $k = 0$ la curvatura aumenta a medida que nos situamos en las bandas más altas. Esto significa que en este caso la masa efectiva de una partícula aumenta a medida que subimos de banda. El nombre de *masa efectiva* se debe a que esta magnitud permite darle a una fuerza exterior cuántica una expresión análoga a la de la Mecánica Clásica newtoniana. Así, los portadores con masa efectiva grande son “más pesados” y por lo tanto “más difíciles” de desplazar para producir una corriente.

2.3. Modelo de Esaki-Tsu: comportamiento dinámico

Vamos a describir ahora el funcionamiento de una superred cuando se aplica un voltaje y el campo eléctrico actúa sobre los portadores de carga causando su movimiento. Una de las cualidades más interesantes de las superredes es que exhiben distintos mecanismos para el transporte dependiendo de sus características estructurales y funcionales.

Esaki y Tsu idearon el modelo para describir el transporte electrónico a través de la banda de energía más baja. La derivación parte de la ecuación semiclásica del movimiento

de un electrón en un sólido unidimensional al que se aplica un campo eléctrico F :

$$\hbar \frac{dk}{dt} = eF \quad (2.3.1)$$

La velocidad de grupo entonces se obtiene como

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \quad (2.3.2)$$

donde $E(k)$ es la relación de dispersión. La ecuación (2.3.1) tiene como solución

$$k(t) = k(0) + \frac{eFt}{\hbar} \quad (2.3.3)$$

Ahora podemos suponer (como en [18]) que la relación de dispersión es sinusoidal:

$$E(k) = \frac{\Delta}{2} [1 - \cos(kl)] \quad (2.3.4)$$

donde Δ es la anchura de la banda y l es el período de la superred. Se obtiene entonces

$$v_g = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin\left(\Phi + \frac{eFl}{\hbar}t\right) \quad (2.3.5)$$

o sea, la velocidad de grupo de los electrones oscila en el tiempo con la frecuencia

$$w_B = \frac{eFl}{\hbar} \quad (2.3.6)$$

que se llama *frecuencia de Bloch*. La ecuación (2.3.5) significa físicamente que los electrones son acelerados hasta el borde de la primera zona de Brillouin con momento $k = \frac{\pi}{l}$ y luego sufren una reflexión Bragg, adquiriendo un momento $-k$. En sólidos cristalinos la frecuencia de Bloch es muy alta, del orden de varios THz, pero debido a que los tiempos de scattering son muy pequeños y las bandas muy anchas, el electrón sufre alguna colisión antes de alcanzar el borde de la zona de Brillouin y no completa la oscilación, por lo que no se han observado estas oscilaciones en sólidos formados por un solo semiconductor.

De esta imposibilidad (de completar la oscilación) surgió la idea de Esaki y Tsu de construir estructuras artificiales con potenciales de período mayor que el de los cristales naturales, de forma que los electrones interactuaran solo débilmente con los del pozo vecino. Así se crearían bandas más estrechas, permitiendo a los electrones completar una oscilación sin sufrir scattering y por lo tanto generando oscilaciones macroscópicas de muy alta frecuencia. Además, para completar el modelo con los procesos de scattering, introdujeron fenomenológicamente un tiempo medio de colisiones τ_s a través de una probabilidad exponencial decreciente de transporte sin colisiones (*balístico*). La velocidad global de los electrones es entonces promediada sobre todo el gas:

$$v = \int_0^\infty e^{-\frac{t}{\tau_s}} dv_g = \frac{eF}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} e^{-\frac{t}{\tau_s}} dt \quad (2.3.7)$$

donde hemos utilizado (2.3.1) y (2.3.2). De (2.3.4) obtenemos

$$\begin{aligned} v(F) &= \frac{\mu F}{1 + (\frac{F}{F_c})^2} \\ \mu &= \frac{e\tau_s}{m^*} \\ m^* &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} = \frac{\Delta l^2}{2\hbar^2} \\ F_c &= \frac{\hbar}{e\tau_s l} \end{aligned}$$

donde μ es la movilidad, m^* la masa efectiva en el fondo de la minibanda, y F_c el campo eléctrico para el cual la curva $v(F)$ alcanza su máximo, comenzando a decrecer para campos mayores. La curva $v(F)$ entonces, según este modelo, tiene un intervalo donde es decreciente, o sea existe una zona de *conductancia diferencial negativa*. Esta característica será la clave para entender el comportamiento fuertemente no lineal de las superredes semiconductoras.

2.4. Superredes fuertemente y débilmente acopladas

Como ya hemos dicho, el comportamiento dinámico de una superred semiconductor depende estrictamente de su estructura, o sea básicamente de tres ingredientes: la estructura de bandas (a través del acoplamiento entre primeros vecinos), la magnitud de la caída de potencial en un período debida al campo eFl y la magnitud de los procesos de scattering $\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$ (donde τ es el tiempo medio entre colisiones). Cuando las barreras son lo suficientemente estrechas (≈ 1 nm), la superred se dice *fuertemente acoplada*. Si el campo eléctrico es relativamente bajo, la mayor parte del transporte se realiza por la primera minibanda de estados extendidos. El fuerte acoplamiento entre pozos y los campos bajos hacen posible utilizar los estados extendidos de Bloch. Las ecuaciones resultantes no distinguen por tanto entre pozos y barreras y son del mismo tipo que las utilizadas para estudiar el transporte en semiconductores. Lo que cambia es la anchura de las bandas de energía permitida, que en las superredes fuertemente acopladas es mucho mayor. De toda forma, no vamos a detallar más este primer tipo de superredes por qué el tema de esta tesi es el estudio de modelos de superredes débilmente acopladas.

Cuando la longitud de la barrera es bastante mayor (≈ 5 nm) que la longitud de onda del electrón dentro de la barrera, la superred se dice *débilmente acoplada*. Ahora la descripción de las propiedades electrónicas se puede basar en considerar múltiples pozos aislados en los que se acoplan débilmente los niveles discretos para dar lugar a *subbandas*. En estas circunstancias, una modelización correcta debe trabajar con la base de autoestados de pozos individuales conectados mediante corrientes túnel a través de las barreras. Para campos

suficientemente altos (≈ 100 kV/cm), la subbanda de menor energía de un pozo se acopla, o sea se sitúa a la misma energía, con la primera subbanda de energía superior del pozo contiguo, dando lugar a *túnel resonante*: la probabilidad de paso por efecto túnel de la barrera es máxima cuando al otro lado, es decir, en el pozo vecino, hay estados vacantes con la misma energía. Al electrón situado en una subbanda más alta que la fundamental pueden ocurrirle dos cosas: que pase de nuevo por efecto túnel resonante a una subbanda superior del pozo contiguo, o que sufra scattering a la subbanda inferior del mismo pozo. Pero en una superred con un potencial rectangular es imposible alcanzar una resonancia entre niveles de tres pozos distintos, ya que la distancia intersubbanda se incrementa con el índice de la subbanda. Así la opción más probable es que decaiga por scattering a la subbanda más baja del pozo en el que se encuentra. A continuación vuelve a pasar por efecto túnel al pozo de al lado. De ahí la calificación de secuencial. Su primera evidencia experimental se debe a Capasso *et al* [15].

Tanto las superredes fuertemente acopladas como las superredes débilmente acopladas operan bajo voltajes aplicados intensos que, o bien les hacen cambiar entre dos estados estacionarios de conducción, o bien provocan la aparición de oscilaciones. Estos efectos se llaman inestabilidades electrónicas. Matemáticamente significa que los parámetros que gobiernan el tipo de respuesta (o solución) que presenta el dispositivo (o el modelo), como el voltaje externo aplicado, toman valores que lo sitúan en zonas de su espacio de fase donde aparecen cambios de comportamiento (o bifurcaciones). Un denominador común del funcionamiento en estas circunstancias de estos y otros dispositivos es la aparición de zonas de *Conductancia Diferencial Negativa*, o sea de zonas donde:

$$\frac{dv(F)}{dF} = 0 \quad (2.4.1)$$

Este comportamiento anómalo (en principio sería da esperar que a mayor campo aplicado, los electrones fuesen más veloces) ocurre por causas físicas muy diferentes en dispositivos o materiales diversos y tiene como consecuencia común la aparición de inestabilidades y de oscilaciones de la corriente que pueden ser de muy alta frecuencia. En superredes débilmente acopladas, la aparición de zonas de conductancia negativa se debe a la manera en la cual los electrones pasan de un pozo al pozo contiguo. Cuando las subbandas están en resonancia, la transmisión de corriente es máxima. Si el campo aumenta más, los niveles se desalinean y, al no haber estados vacantes con la misma energía al otro lado de la barrera, menos electrones pasan al pozo siguiente y la velocidad de grupo disminuye, obteniéndose la zona de Conductancia Diferencial Negativa.

Capítulo 3

El modelo matemático discreto de convección-difusión

3.1. Introducción

En este Capítulo vamos a tratar un modelo reducido descrito por ecuaciones de balance para el transporte de carga en superredes fuertemente acopladas. Es un modelo discreto propuesto en 1994 por L.L. Bonilla *et al* [6] para transporte mediante túnel resonante secuencial y su estudio asintótico y numérico se llevará adelante en los Capítulos siguientes.

3.2. Características generales

El modelo que vamos a introducir es de tipo convección-difusión y el mecanismo de transporte principal es el túnel resonante secuencial. Se completa con la ecuación de Poisson y las condiciones de contorno. El análisis de las diferentes escalas de tiempo involucradas permite considerar que en cada pozo hay un campo F_i y una densidad de electrones n_i , y establecer una relación para ellos, por lo que se obtiene un modelo discreto. Toda la información cuántica se introduce a través de la densidad de corriente túnel $eJ_{i \rightarrow i+1}$ y su expresión puede ser derivada de primeros principios microscópicos bajo ciertos límites mediante el método del hamiltoniano de transferencia ([10], [4], [7]). Otro ingrediente fundamental para que se produzcan oscilaciones de la corriente cuando se aplica un voltaje constante es que haya un exceso de carga, es decir, que se hayan introducido en la red cristalina átomos con un electrón más en su capa más externa. Se habla entonces de *superred dopadas*. De esta manera, con un pequeño aporte de energía este electrón queda libre y pasa a la banda de conducción, contribuyendo al transporte de carga.

3.3. Escalas temporales

Para derivar un modelo matemáticamente sencillo y retener por otra parte toda la física del problema a nivel experimental, tenemos que hacer unas suposiciones sobre las diferentes escalas temporales a las que tienen lugar los fenómenos relevantes en el transporte de carga, en el régimen de túnel resonante secuencial. Estas escalas son:

- **Tiempo de relajación dieléctrica** τ_{rd} : es el tiempo necesario para que las fluctuaciones de carga decaigan y se obtenga neutralidad eléctrica local. Su orden de magnitud se puede obtener como el período de la superred dividido por la velocidad electrónica media. Para las superredes que se modelizan en esta tesis es del orden de 10-100 ns.
- **Tiempo túnel entre pozos vecinos** τ_t : es el tiempo que tarda un electrón en pasar de un pozo a otro por efecto túnel mediado por scattering. Es del orden de 500 ps.
- **Tiempo de scattering intersubbanda** τ_s : es el tiempo que tarda un electrón en pasar mediante scattering de una subbanda de energía mayor a la primera subbanda del mismo pozo. Es del orden de 0.1 ps.

Por lo tanto tenemos la siguiente separación de escalas temporales:

$$\tau_s \ll \tau_t \ll \tau_{rd}. \quad (3.3.1)$$

(3.3.1) nos permite suponer que los electrones ocupan sólo la primera subbanda de cada pozo (despreciando τ_s) y que en cada instante de tiempo se puede asignar a cada pozo una densidad de electrones n_i , sin considerar los que en ese instante pueden estar pasando de un pozo a otro (despreciando τ_t). Así pues, integrando la ecuación de Poisson que vamos a introducir a continuación, podemos asignar un valor F_i del campo en cada pozo y podemos calcular la corriente entre dos pozos vecinos en función del campo y la densidad de electrones locales.

3.4. Parámetros físicos

Representan las características físicas de una superred concreta bajo condiciones externas concretas, necesarias para que exista una solución físicamente real al problema. Con su variación se explora el espacio de soluciones posibles. Son:

- **Voltaje externo aplicado (bias)** V : su valor está determinado por la obtención en la muestra del campo eléctrico necesario para alcanzar las condiciones de túnel resonante secuencial.

- **Densidad de corriente J :** es la densidad de corriente total a través de la muestra. Es un parámetro externo cuando no lo es el voltaje.
- **Dopaje N_D :** es el número de átomos donadores que se introducen en la muestra por unidad de volumen. Su valor varía entre 10^{15} y 10^{18} átomos/cm³
- **Numero de pozos N :** como veremos, es necesario un número suficiente de pozos (y barreras) para observar claramente la formación de dominios. En esta tesis $N = 40$, y experimentalmente N varía entre 10 y 100.
- **Longitud del periodo l :** es la suma de las dimensiones de un pozo w y de una barrera b . Están determinadas por la necesidad de obtener por lo menos tres niveles suficientemente separados en un pozo (w varia entre 5 y 20 nm) y barreras que permitan un acoplo débil, pero resonancias suficientemente anchas entre los niveles (b varía entre 2 y 10 nm)

3.5. La corriente túnel

La densidad de corriente túnel $eJ_{i \rightarrow i+1}$ es el ingrediente que relaciona las ecuaciones del modelo en los distintos pozos. Se calcula usando fórmulas explícitas derivadas a partir de consideraciones cuánticas mediante el método del Hamiltoniano de transferencia ([4],[7]), cuando el ensanchamiento de scattering es mucho menor de las energías de las subbandas y de los potenciales químicos. Tenemos:

$$J_{i \rightarrow i+1} = \frac{e v^{(f)}(F_i)}{l} \left\{ n_i - \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{e F_i l}{k_B T} \right) \right] \times \left(\exp \left(\frac{\pi \hbar^2 n_{i+1}}{m^* k_B T} \right) - 1 \right) \right\}, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (3.5.1)$$

En estas fórmulas, m^* es la masa efectiva, T la temperatura, k_B and \hbar son las constantes de Boltzmann y de Planck respectivamente, y la “forward tunneling velocity” $v^{(f)}$ es una suma de Lorentzianas centradas en los valores resonantes del campo $F_{C\nu} = (E_{C\nu} -$

N	N_D (cm ⁻²)	d_W/d_B (nm/nm)	γ (meV)	m^* (10 ⁻³² Kg)	\mathcal{E}_{C_1} (meV)	\mathcal{E}_{C_2} (meV)	\mathcal{E}_{C_3} (meV)	V_b (V)
40	$1,5 \times 10^{11}$	9.0/4.0	8	8,43	44	180	410	0.982

Cuadro 3.1: Parámetros del SL 9/4 en [21].

$E_{C1})/(el):$

$$v^{(f)}(F_i) = \sum_{j=1}^n \frac{\frac{\hbar^3 l (\gamma_{C1} + \gamma_{C_j})}{2m^*} \mathcal{T}_i(\mathcal{E}_{C1})}{(\mathcal{E}_{C1} - \mathcal{E}_{C_j} + eF_i l)^2 + (\gamma_{C1} + \gamma_{C_j})^2}, \quad (3.5.2)$$

$$\mathcal{T}_i(\epsilon) = \frac{16k_i^2 k_{i+1}^2 \alpha_i^2 (k_i^2 + \alpha_i^2)^{-1} (k_{i+1}^2 + \alpha_i^2)^{-1}}{(w + \alpha_{i-1}^{-1} + \alpha_i^{-1})(w + \alpha_{i+1}^{-1} + \alpha_i^{-1}) e^{2\alpha_i d}}, \quad (3.5.3)$$

$$\hbar k_i = \sqrt{2m^* \epsilon}, \quad (3.5.4)$$

$$\hbar k_{i+1} = \sqrt{2m^* [\epsilon + e(d + w)F_i]}, \quad (3.5.5)$$

$$\hbar \alpha_{i-1} = \sqrt{2m^* \left[eV_b + e \left(d + \frac{w}{2} \right) F_i - \epsilon \right]}, \quad (3.5.6)$$

$$\hbar \alpha_i = \sqrt{2m^* \left[eV_b - \frac{ewF_i}{2} - \epsilon \right]}, \quad (3.5.7)$$

$$\hbar \alpha_{i+1} = \sqrt{2m^* \left[eV_b - e \left(d + \frac{3w}{2} \right) F_i - \epsilon \right]}. \quad (3.5.8)$$

En estas ecuaciones, C_j indica la j -ésima subbanda de un pozo, E_{C_j} es su energía medida desde el fondo del pozo, γ_{C_j} es la anchura de scattering, \mathcal{T}_i es la probabilidad sin dimensiones de transmisión a través de la i -ésima barrera, y eV_b es la altura de la barrera en ausencia de caídas de potencial. Valores típicos de estos parámetros estan en el Cuadro 3.1.

Las fórmulas para $J_{i \rightarrow i+1}$ obtenidas con distintos métodos nos dan una corriente túnel parecida a la Fig. 3.1, y éste es el motivo por el cual obtenemos resultados parecidos.

3.6. Ecuaciones

Contamos la barrera que separa el ánodo del primer pozo de la superred como barrera 0. Entonces el período i -ésimo de la superred empieza a la derecha de la $(i - 1)$ -ésima barrera y termina a la derecha de la i -ésima barrera.

Las ecuaciones del modelo relacionan matemáticamente las variables y los parámetros de

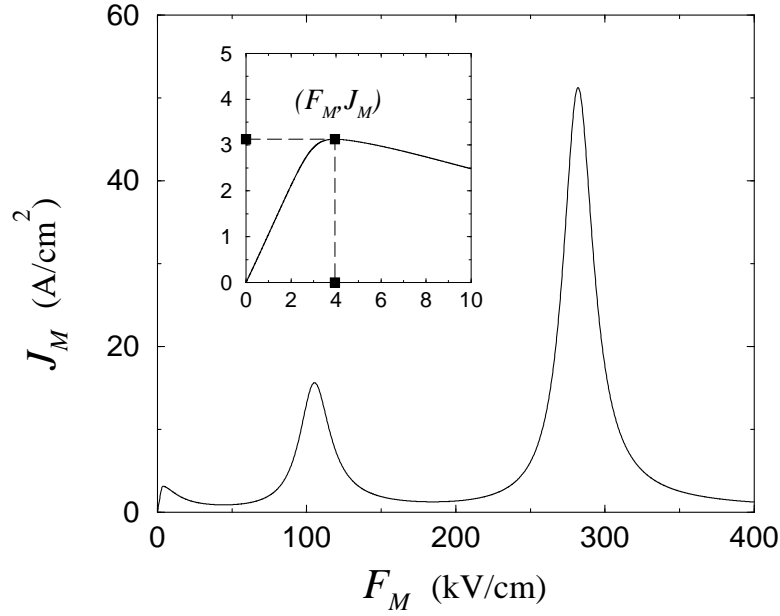


Figura 3.1: Densidad de corriente túnel para $n_i = n_{i+1} = N_D$ como función del campo $F_i = F$, de lo cual se deduce que $F_M \approx 3,945$ kV/cm y $J_M \approx 3,1269$ A/cm² para $T = 5$ K y para los valores del SL en el Cuadro 3.1.

la siguiente forma:

$$F_i - F_{i-1} = \frac{e}{\varepsilon}(n_i - N_D^w), \quad (3.6.1)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = J_{i-1 \rightarrow i} - J_{i \rightarrow i+1}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.6.2)$$

$$\frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N F_i = \frac{V}{(N+1)l} \quad (3.6.3)$$

$$J_{0 \rightarrow 1} = \sigma F_0, \quad (3.6.4)$$

$$J_{N \rightarrow N+1} = \sigma F_N \frac{n_N}{N_D}. \quad (3.6.5)$$

donde e es la carga del electrón, ε la permitividad media de la superred, N_D^w la densidad de dopaje del pozo i y σ la conductividad de los contactos.

- (3.6.1) es la ecuación de **Poisson** (discreta): relaciona la diferencia del valor del campo eléctrico entre dos pozos con la acumulación de carga que la produce, resultado de restar a la densidad de carga negativa n_i la densidad de átomos donadores N_D que han cedido un electrón, y que por tanto están cargados positivamente.
- (3.6.2) es la ecuación de la **continuidad de carga**: la variación de la densidad de carga n_i en el pozo i es la diferencia entre la carga entrante desde el pozo $i - 1$ y la

carga saliente hacia el pozo $i + 1$.

- (3.6.3) es la ecuación del **bias**: establece que el voltaje aplicado externo o bias V es la suma de las caídas de voltaje $F_i l$ en cada uno de los pozos.
- (3.6.4) y (3.6.5) son las **condiciones de contorno**: la relación entre densidad de corriente y campo eléctrico es lineal en los contactos, como en [1].

Derivando (3.6.1) respecto al tiempo e insertando el resultado en (3.6.2), obtenemos

$$\frac{\varepsilon}{e} \frac{dF_i}{dt} + J_{i \rightarrow i+1} = J \quad (3.6.6)$$

que es una ley de **Ampere**: la corriente total eJ a través de la superred es la suma de la corriente de desplazamiento de Maxwell y de la corriente túnel entre el pozo i y $i + 1$.

3.7. Adimensionalización

Para tratar numéricamente las ecuaciones es aconsejable quitar las dimensiones para que todos los términos sean de orden unidad y se condense la influencia de los parámetros en el mínimo números de ellos, facilitando así la interpretación de las soluciones. Fijamos primero las escalas necesarias, por lo que establecemos como unidad de campo el valor para el cual se alcanza el primer máximo de la curva $v(F)$, que llamamos F_M . A partir de este valor obtenemos la unidad de velocidad como $v_M = v(F_M)$. Como unidad de densidad de carga fijamos el dopaje de la superred N_D . El resto de las unidades surgen de las ya tomadas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} E_i &= \frac{F_i}{F_M}, & \tilde{n}_i &= \frac{n_i}{N_D}, & \tilde{J}_{i \rightarrow i+1} &= \frac{J_{i \rightarrow i+1}}{J_M}, \\ \tilde{J} &= \frac{J}{J_M}, & \tilde{t} &= \frac{t}{t_0} \equiv \frac{J_M t}{\varepsilon F_M}, & \tilde{v}(E_i) &= \frac{v(F_i)}{v_M} \\ \tilde{V} &= \frac{V}{V_{i_0}} \equiv \frac{V}{(N+1) F_M l}, & \tilde{\sigma} &= \rho_c \sigma \equiv \frac{F_M \sigma}{J_M}, & v_M &= \frac{J_M l}{e N_D} \end{aligned} \quad (3.7.1)$$

Introduciendo (3.7.1) en (3.6.1) - (3.6.6), y quitando las tildes, obtenemos el siguiente modelo adimensional:

$$\frac{dE_i}{dt} + J_{i \rightarrow i+1} = J, \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.7.2)$$

$$\sum_{i=0}^N E_i = (N+1)V, \quad (3.7.3)$$

$$J_{i \rightarrow i+1} = v(E_i) \left\{ n_i - \rho_0 \ln \left[1 + e^{-aE_i} \left(e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0}} - 1 \right) \right] \right\}, i = 1, \dots, N-1, \quad (3.7.4)$$

$$J_{0 \rightarrow 1} = \sigma E_0, \quad (3.7.5)$$

$$J_{N \rightarrow N+1} = \sigma E_N n_N. \quad (3.7.6)$$

donde

$$\nu = \frac{eN_D}{\varepsilon F_M}, \quad \rho_0 = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2 N_D}, \quad a = \frac{elF_M}{k_B T}, \quad (3.7.7)$$

son parámetros sin dimensiones. Sus valores para el SL descrito en el Cuadro 3.1 están en el Cuadro 3.2. La Fig. 3.1 enseña la densidad de corriente túnel como función del perfil homogéneo $F_i = F$ cuando las densidades de electrones n_i son puestas iguales a la densidad de dopaje en todos los pozos de la superred. Observamos varios máximos relativos, el primero de los cuales nos da los valores de F_M y J_M . Los intervalos del campo entre dos máximos corresponden aproximadamente a los plateau en la curva característica I-V.

Cuadro 3.2: Typical scales for $T = 5$ K.

F_M	J_M	v_M	x_0	t_0	ν	ρ_0	ρ_c	V_0
(kV/cm)	(A/cm ²)	(m/s)	(nm)	(ns)	(-)	(-)	(Ω m)	(V)
—	—	$\frac{J_M l}{e N_D}$	$\frac{\varepsilon F_M l}{e N_D}$	$\frac{\varepsilon F_M}{J_M}$	$\frac{e N_D}{\varepsilon F_M}$	$\frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2 N_D}$	$\frac{l F_M}{e v_M N_D}$	$F_M N l$
3.945	3.127	1.691	2.494	2.066	5.212	0.111	12.62	0.205

Capítulo 4

Característica corriente-voltaje e inestabilidades de la corriente

4.1. Introducción

En este Capítulo estudiamos las soluciones del modelo de convección-difusión presentado en el Capítulo anterior para superredes funcionando en régimen de túnel resonante secuencial. Aunque el modelo es bastante sencillo, la no linealidad de la corriente túnel y el elevado número de grados de libertad que presenta el sistema hace que el espectro de soluciones sea muy rico, y en particular presente inestabilidades de la corriente y soluciones periódicas. Esto hace que las superredes sean muy interesantes desde el punto de vista tecnológico como dispositivos generadores de señales de alta frecuencia, con una ventaja fundamental respecto a los osciladores Gunn: la posibilidad de sintonizar esta variando el voltaje aplicado.

La aparición de dominios de campo eléctrico en superredes semiconductoras dopadas remonta por lo menos al año 1974, cuando Esaki y Chang dieron cuenta de esa aparición en [17]. La conductividad de una superred dopada de GaAs/AlAs exhibía oscilaciones en función del voltaje aplicado, y éstas tenían correlación con la separación entre las dos primeras subbandas, por lo que se atribuyeron a formación de dominios. Cuando las técnicas de crecimiento epitaxial se refinaron lo suficiente, fué posible observar claramente las ramas en la característica I - V para valores del voltaje entre las dos resonancias.

En la Sec. (4.2) vamos a construir numéricamente la curva característica corriente – voltaje I - V , mientras en la Sec. (4.3) haremos un estudio de la estabilidad lineal, encontrando posibles puntos de bifurcación de Hopf cerca de las extremidades de las ramas estacionarias. Finalmente, en la Sec. (4.4) estudiamos, con un método de escalas múltiples, la bifurcación de Hopf.

Resumimos brevemente el modelo (adimensional) de convección-difusión presentado en el Cap.(3). Consiste de las ecuaciones

$$\frac{dE_i}{dt} + J_{i \rightarrow i+1} = J, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.1.1)$$

$$\sum_{i=0}^N E_i = (N+1)V(t), \quad (4.1.2)$$

$$J_{i \rightarrow i+1} = v(E_i) \left\{ n_i - \rho_0 \ln \left[1 + e^{-aE_i} \left(e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0}} - 1 \right) \right] \right\}, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (4.1.3)$$

$$J_{0 \rightarrow 1} = \sigma E_0, \quad (4.1.4)$$

$$J_{N \rightarrow N+1} = \sigma E_N n_N. \quad (4.1.5)$$

donde el único cambio respecto a (3.7.2) - (3.7.6) está en la condición del *bias* (4.1.2), porque aquí la caída de potencial en la superred es una función $V(t)$ que depende del tiempo. Esto es necesario para ‘reproducir’ numéricamente lo que pasa en los experimentos, o sea para poder mover el voltaje, y por lo tanto el sistema, de manera ‘continua’ desde un estado a otro muy cerca. Llamaremos *up-sweep* (*down-sweep*), o in general *sweeping*, la transición continua de V_i a V_f con $V_f > V_i$ ($V_f < V_i$) en un intervalo de tiempo que llamaremos tiempo de ramping, en general muy breve pero suficiente para permitir un proceso adiabático.

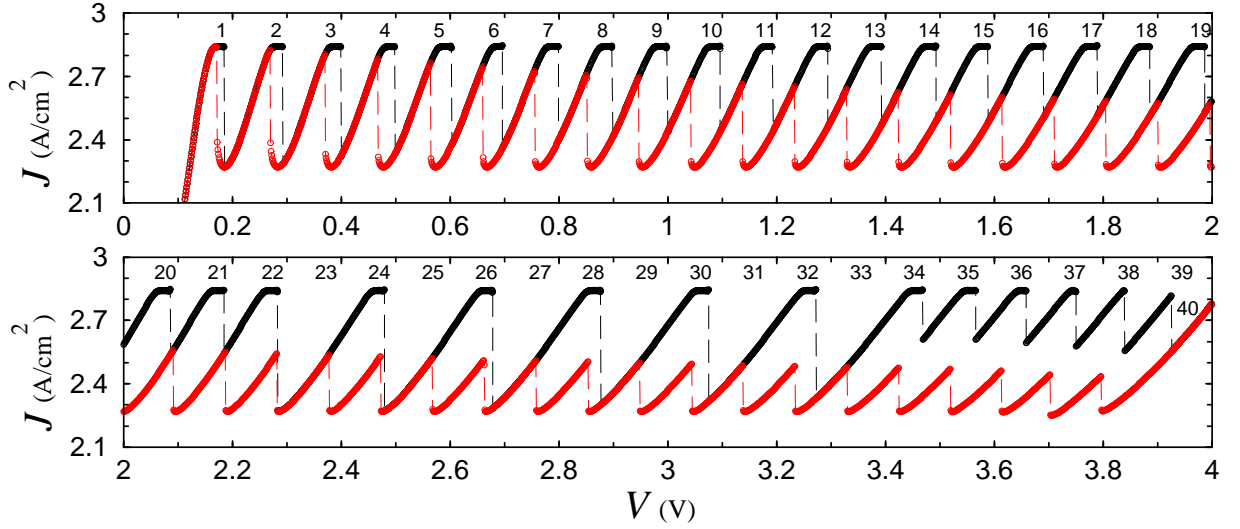


Figura 4.1: Curva característica I-V de la superred 9/4 de Ref. [21] obtenida haciendo crecer y decrecer adiabáticamente $V \in [0, 4]$ V. Los parámetros corresponden a la Tabla 3.1 a 5 K y resistividad del cátodo de $25.2 \, \Omega\text{m}$ ($\tilde{\sigma} = 0.5$). El número de la rama crece con el voltaje: la i -ésima rama tiene una capa de acumulación de carga que separa los dominios de campo alto y de campo bajo que se sitúa en el pozo $(N - i + 1)$ -ésimo.

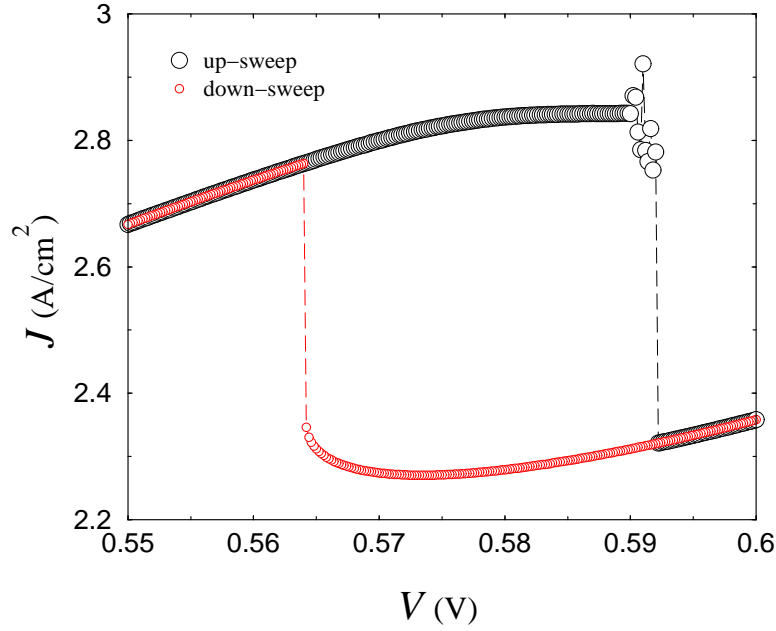


Figura 4.2: Biestabilidad entre las ramas 5 y 6 de la característica I-V de Fig. 4.1 ($V \in [0,55, 0,6]$ V). La solución estacionaria resulta inestable con soluciones oscilatorias de pequeña amplitud cerca de la extremidad superior de la rama 5.

4.2. Estados estacionarios

Resolviendo numéricamente el modelo de convección-difusión construimos el primer *plateau* de la curva característica I-V para la superred cuyos parámetros principales están en la tabla (3.1), a temperatura $T = 5$ K y resistividad de los contactos $1/\sigma = 25,2 \Omega\text{m}$ ($\tilde{\sigma} = 0,5$). La Fig. (4.1) muestra la parte de ramas estacionarias obtenidas haciendo *up-sweep* y *down-sweep* del voltaje desde cero Voltios hasta el final del primer plateau y desde valores altos del voltaje hasta cero.

Nótese que las partes superiores de las ramas que hemos numerado como impares (desde la 23ésima hasta la 33ésima) no aparecen por que corresponden a regiones de biestabilidad y son saltadas durante el proceso de *up-sweep*. De la misma manera, las partes centrales de las ramas que van de la 35-ésima a la 39-ésima no aparecen por que corresponden a regiones de tri-estabilidad y son saltadas durante los procesos de *up-sweep* y *down-sweep*. Todas estas curvas que faltan se pueden obtener haciendo *up-sweep* empezando desde la parte que está en figura. La cuenca de atracción de las ramas estacionarias de la Fig. (4.1) es muy pequeña cerca de las extremidades y es exáctamente en esas regiones que nuestro método numérico de alta precisión mejora los resultados antecedentes, como se ve en Fig. (4.2). Además, hemos encontrado que las ramas I-V pueden pasar por bifurcación de

Hopf a soluciones oscilatorias de pequeña amplitud cerca de las extremidades superiores, como explicaremos más adelante.

Según su estabilidad, podemos distinguir cuatro tipos de ramas I–V:

1. La primera rama B_1 es monoestable desde $V = 0$ hasta que su extremo superior coincide con el extremo inferior de B_2 , creando entonces una pequeña región de biestabilidad.
2. De B_2 a B_{21} , la longitud de las ramas aumenta (B_2 mide 0.122 V y B_{19} mide 0.177 V) a la vez que la pendiente (la conductividad diferencial positiva) disminuye. Se puede ver que las ramas con voltaje bajo tienen una pendiente empinada parecida a la que tiene la curva antes del primer máximo de la densidad de corriente túnel homogénea en Fig. (3.1). ¿Por qué? El perfil del campo en ramas con voltaje pequeño es parecido al perfil de una solución con campo espacialmente uniforme, que cumple entonces $J_{i \rightarrow i+1}(F, N_D, N_D) = J$, correspondiente a la primera rama de Fig. (3.1). De la misma manera, las ramas con voltaje alto son parecidas a perfiles de campo espacialmente homogéneo que cumplen la misma relación, pero ésta vez el perfil del campo corresponde a la tercera rama de Fig. (3.1). Ramas con voltaje intermedio son una combinación de dominios con campo alto y bajo, entonces las pendientes son una interpolación entre conductividad diferencial positiva baja y alta. La parte central de cada rama corresponde a una región de monoestabilidad, mientras que los extremos son regiones de biestabilidad. Conforme el número de rama crece, la región central se va estrechando y las regiones de biestabilidad que incluyen las extremidades de las ramas crecen.
3. La rama B_{22} es la última que tiene un rango de monoestabilidad en el centro, y la primera en la que el extremo superior es un rango de triestabilidad, coincidiendo con la parte central de la rama B_{23} y el extremo inferior de la rama B_{24} .
4. La rama B_{23} es biestable excepto en el centro y en el extremo superior, donde es triestable. Nótese que el extremo inferior es todavía biestable.
5. De B_{24} a B_{39} las ramas son triestables en el centro y los extremos y biestables en el resto. Los rangos de triestabilidad se van ensanchando conforme el voltage va creciendo, pero siempre quedan dos rangos de biestabilidad.
6. La rama B_{40} es la última: es triestable en su extremidad inferior, biestable en la parte central, y monoestable hasta llegar al segundo plateau.

4.3. Estabilidad lineal

Linealizamos (3.7.2) - (3.7.6) cerca de una solución estacionaria E_i^* , $i = 0, \dots, N$. Sea

$$E_i(t) = E_i^* + \varepsilon \tilde{e}_i(t), \quad J(t) = J^* + \varepsilon \tilde{j}(t), \quad \varepsilon \ll 1. \quad (4.3.1)$$

Insertando (4.3.1) en (3.7.2) - (3.7.6) llegamos a

$$\frac{d\tilde{e}_i}{dt} + a_i \tilde{e}_{i-1} + b_i \tilde{e}_i + c_i \tilde{e}_{i+1} = \tilde{j}, \quad i = 1, \dots, N \quad (4.3.2)$$

$$\frac{d\tilde{e}_0}{dt} + \sigma \tilde{e}_0 = \tilde{j} \quad (4.3.3)$$

$$\frac{d\tilde{e}_N}{dt} + \eta \tilde{e}_N + \gamma \tilde{e}_{N-1} = \tilde{j} \quad (4.3.4)$$

$$\sum_{i=0}^N \tilde{e}_i = 0, \quad (4.3.5)$$

donde introducimos las siguientes constantes que dependen del perfil estacionario:

$$a_i = \left(\frac{\partial J_{i \rightarrow i+1}}{\partial E_{i-1}} \right)_{\mathbf{E}=\mathbf{E}^*}, \quad b_i = \left(\frac{\partial J_{i \rightarrow i+1}}{\partial E_i} \right)_{\mathbf{E}=\mathbf{E}^*}, \quad c_i = \left(\frac{\partial J_{i \rightarrow i+1}}{\partial E_{i+1}} \right)_{\mathbf{E}=\mathbf{E}^*}, \quad (4.3.6)$$

y

$$\gamma = -\frac{\sigma E_N^*}{\nu}, \quad \eta = \frac{J^*}{E_N^*} + \frac{\sigma E_N^*}{\nu}. \quad (4.3.7)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (4.3.2) - (4.3.5) puede resolverse por la separación de variables:

$$\tilde{e}_i = \hat{e}_i e^{\lambda t}, \quad \tilde{j} = \hat{j} e^{\lambda t} \quad (4.3.8)$$

Sustituyendo (4.3.8) en (4.3.2) - (4.3.5) llegamos al sistema lineal

$$\lambda \hat{e}_i = \hat{j} - a_i \hat{e}_{i-1} - b_i \hat{e}_i - c_i \hat{e}_{i+1}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (4.3.9)$$

$$\lambda \hat{e}_0 = \sigma \hat{j} \quad (4.3.10)$$

$$\lambda \hat{e}_N = \hat{j} - \gamma \hat{e}_{N-1} - \eta \hat{e}_N \quad (4.3.11)$$

$$\sum_{i=0}^N \hat{e}_i = 0 \quad (4.3.12)$$

que determina los \hat{e}_i en función del autovalor λ .

Poniendo todo en forma matricial queda:

$$\lambda \hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{j}} - \mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{e}} \quad (4.3.13)$$

o sea:

$$\lambda \begin{pmatrix} \hat{e}_0 \\ \hat{e}_1 \\ \vdots \\ \hat{e}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{j} \\ \hat{j} \\ \vdots \\ \hat{j} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{e}_0 \\ \hat{e}_1 \\ \vdots \\ \hat{e}_N \end{pmatrix} \quad (4.3.14)$$

con $b_0 = \sigma$, $c_0 = 0$, $a_N = \gamma$, $b_N = \eta$.

Podemos reescribir (4.3.13) de la forma $(\lambda \mathbf{I} + \mathbf{M}) \cdot \hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{j}}$, lo cual implica que $\hat{\mathbf{e}} = (\lambda \mathbf{I} + \mathbf{M})^{-1} \cdot \hat{\mathbf{j}}$. Entonces de (4.3.12) tenemos:

$$\sum_{i=0}^N (\lambda \mathbf{I} + \mathbf{M})^{-1} \cdot \mathbf{1} = 0 \quad (4.3.15)$$

que es una ecuación polinómica de grado N en λ , con N ceros por tanto. Sumando las filas y incorporando la condición del bias (4.3.12) llegamos a:

$$(N+1)\hat{j} = \hat{e}_0(a_1 + b_0) + \dots + \hat{e}_i(a_{i+1} + b_i + c_{i-1}) + \dots + \hat{e}_N(b_N + c_{N-1}). \quad (4.3.16)$$

Definiendo

$$\begin{aligned} s_i &= a_{i+1} + b_i + c_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N-1 \\ s_0 &= a_1 + b_0 \\ s_N &= b_N + c_{N-1} \end{aligned} \quad (4.3.17)$$

tenemos:

$$\hat{j} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N s_i \hat{e}_i \quad (4.3.18)$$

y sustituyendo en (4.3.14) obtenemos finalmente

$$\lambda \begin{pmatrix} \hat{e}_0 \\ \hat{e}_1 \\ \vdots \\ \hat{e}_N \end{pmatrix} = \left\{ \frac{1}{N+1} \begin{pmatrix} s_0 & s_1 & \dots & s_N \\ s_0 & s_1 & \dots & s_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ s_0 & s_1 & \dots & s_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \right\} \cdot \begin{pmatrix} \hat{e}_0 \\ \hat{e}_1 \\ \vdots \\ \hat{e}_N \end{pmatrix}. \quad (4.3.19)$$

Una raíz de esta ecuación es cero, las otras son los N autovalores de (4.3.15). Resolviendo numéricamente (4.3.19) para distintos valores del voltaje, encontramos los resultados que se muestran en las Figuras 4.3 y 4.4.

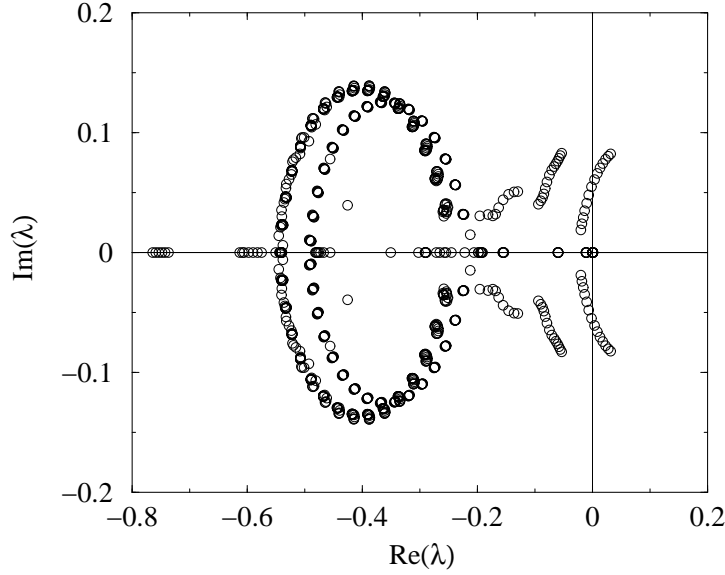


Figura 4.3: Evolución de los 41 autovalores que determinan la estabilidad lineal de la rama estacionaria B_{35} para 20 valores del voltaje aplicado de $V = 3,54$ a $3,56$ V.

4.4. Ecuación de amplitud

De las Fig. (4.3) y (4.4) y de las simulaciones numéricas del modelo (que vamos a detallar en el capítulo a continuación) se deduce que cerca de la extremidades superiores de las ramas la solución cesa de ser estacionaria y se convierte en oscilatoria cuando el voltaje V pertenece a un intervalo que llamaremos (V_α, V_β) : el sistema experimenta una bifurcación de Hopf. Para describir este fenómeno cualitativamente, vamos a tener en cuenta las no linealidades que juegan un papel importante cuando el voltaje supera el valor crítico V_c . De hecho, la perturbación de un estado estacionario con un voltaje próximo al crítico está gobernada por una ecuación de amplitud que describe el comportamiento esencial, tanto de forma cualitativa que cuantitativa. En nuestro caso, queremos obtener la siguiente información del cálculo de esta ecuación. Por una parte, determinaremos la posición exacta del punto de Hopf degenerado, donde la naturaleza del comienzo de las oscilaciones de la corriente pasa de ser supercrítica a ser subcrítica. Por otra parte, la ecuación de amplitud nos determinará la dependencia de la frecuencia con el voltaje cerca de $V = V_c$.

4.4.1. Condición de no-resonancia

Queremos saber bajo qué condiciones el problema lineal no homogéneo asociado a (4.3.2) - (4.3.5) tiene solución acotada y periódica en el tiempo, o sea, queremos saber

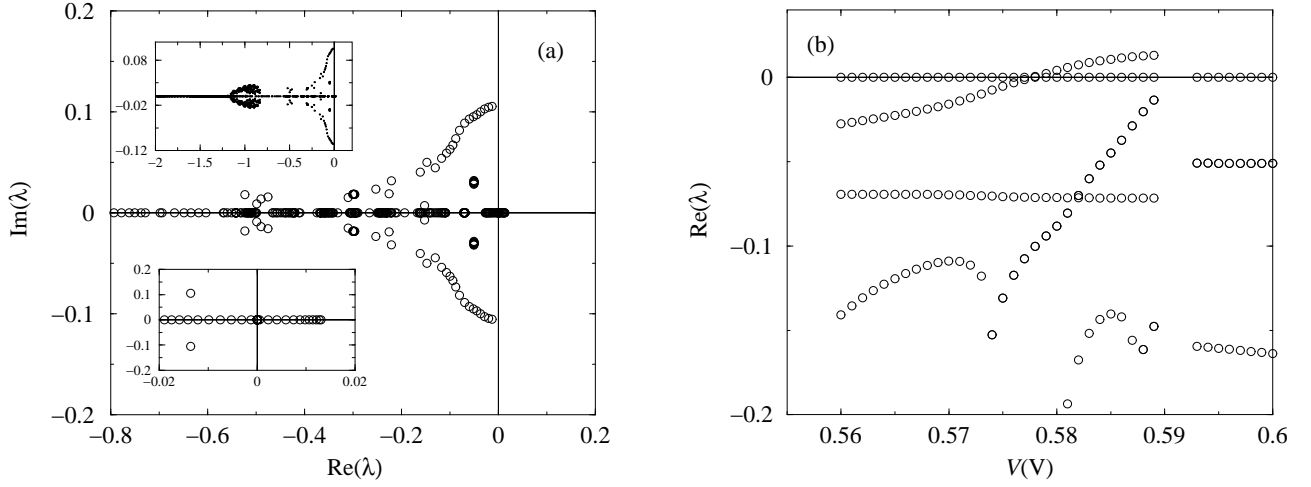


Figura 4.4: (a) Evolución de los 41 autovalores que determinan la estabilidad lineal de la rama estacionaria B_5 para 20 valores del voltaje aplicado de $V = 0,56$ a $0,6$ V. Los cuadros muestran la figura con todos los autovalores y un zoom de la región cerca del eje imaginario. (b) Parte real de los autovalores en función del voltaje. El *gap* en la figura corresponde a la inestabilidad oscilatoria.

bajo qué condiciones no existen términos seculares en nuestros cálculos. Sean $\lambda = \pm i\omega$ un par de autovalores que cruzan el eje imaginario cuando el voltaje está en el voltaje crítico V_c . Entonces el problema lineal no homogéneo es:

$$\frac{d\tilde{e}_i}{dt} + a_i\tilde{e}_{i-1} + b_i\tilde{e}_i + c_i\tilde{e}_{i+1} - \tilde{j} = f_i e^{i\omega t}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (4.4.1)$$

$$\frac{d\tilde{e}_0}{dt} + \sigma\tilde{e}_0 - \tilde{j} = g_0 e^{i\omega t} \quad (4.4.2)$$

$$\frac{d\tilde{e}_N}{dt} + \eta\tilde{e}_N + \gamma\tilde{e}_{N-1} - \tilde{j} = g_N e^{i\omega t} \quad (4.4.3)$$

$$\sum_{i=0}^N \tilde{e}_i = 0 \quad (4.4.4)$$

Poniendo

$$\tilde{e}_i = \hat{e}_i e^{i\omega t}, \quad \tilde{j} = \hat{j} e^{i\omega t} \quad (4.4.5)$$

en (4.4.1) - (4.4.4) nos queda

$$a_i \hat{e}_{i-1} + (b_i + i\omega) \hat{e}_i + c_i \hat{e}_{i+1} = \hat{j} + f_i, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (4.4.6)$$

$$(\sigma + i\omega) \hat{e}_0 = \hat{j} + g_0, \quad (4.4.7)$$

$$\gamma \hat{e}_{N-1} + (\eta + i\omega) \hat{e}_N = \hat{j} + g_N, \quad (4.4.8)$$

$$\sum_{i=0}^N \hat{e}_i = 0. \quad (4.4.9)$$

Si reescribimos todo en forma matricial, (4.4.6) - (4.4.9) se convierten en:

$$(\mathbf{M} + i\omega \mathbf{I}) \vec{e} = \vec{j} + \vec{f} + \vec{g}, \quad (4.4.10)$$

donde

$$\vec{j} = (\hat{j}, \dots, \hat{j})^T, \quad \vec{f} = (0, f_1, \dots, f_{N-1}, 0)^T, \quad \vec{g} = (g_0, 0, \dots, 0, g_N)^T \quad (4.4.11)$$

y \mathbf{M} está definida en (4.3.13) - (4.3.14) como

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \quad (4.4.12)$$

La solución de (4.4.10) es $\vec{e} = (\mathbf{M} + i\omega \mathbf{I})^{-1} (\vec{j} + \vec{f} + \vec{g})$ y tiene que cumplir (4.4.9). Como el término proporcional a \hat{j} ya cumplía la ecuación (4.4.9), la condición para no tener términos seculares es que la suma de los otros dos términos se anule, o sea

$$\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \langle (\mathbf{M} + i\omega \mathbf{I})^{-1} \rangle_{ij} (f_j + g_j) = 0. \quad (4.4.13)$$

Llameremos a (4.4.13) *condición de no resonancia* y la utilizaremos para hallar nuestra ecuación de amplitud.

4.4.2. Bifurcación de Hopf

Llamamos $E_{i,c}^*$ y J_c^* el perfil estacionario de campo eléctrico y la corriente correspondientes al voltaje crítico V_c . Queremos construir la solución periódica que bifurca de $V = V_c$. Sea ϵ un parámetro que define la desviación del voltaje crítico

$$V = V_c + \epsilon^2 \varphi \quad \epsilon \ll 1 \quad (4.4.14)$$

donde $\varphi = \pm 1$ según $V_c = V_\alpha$ o $V_c = V_\beta$. Entonces $\forall i = 0, \dots, N$ los correspondientes campos y corriente son:

$$E_i^*(\epsilon) = E_{i,c}^* + \varphi \epsilon^2 \left(\frac{dE_i^*}{dV} \right)_{V=V_c} + O(\epsilon^4)$$

$$J^*(\varepsilon) = J_c^* + \varphi \varepsilon^2 \left(\frac{dJ^*}{dV} \right)_{V=V_c} + O(\varepsilon^4) \quad (4.4.15)$$

Ponemos ahora $E_{i,c}^{*,V} = \left(\frac{dE_i^*}{dV} \right)_{V=V_c}$ y $J_c^{*,V} = \left(\frac{dJ^*}{dV} \right)_{V=V_c}$. Insertando (4.4.15) en (4.3.2), los términos a orden $O(1)$ son conocidos y los a orden $O(\varepsilon^2)$ cumplen las ecuaciones:

$$\begin{aligned} a_i E_{i-1,c}^{*,V} + b_i E_{i,c}^{*,V} + c_i E_{i+1,c}^{*,V} - J_c^{*,V} &= 0, \quad i = 1, \dots, N-1, \\ J_c^{*,V} &= \sigma E_{0,c}^{*,V}, \quad J_c^{*,V} = \sigma E_{N,c}^{*,V} \left(\frac{2E_{N,c}^* - E_{N-1,c}^*}{\nu} + 1 \right) - \sigma E_{N-1,c}^{*,V} \frac{E_{N,c}^*}{\nu}, \\ \sum_{i=0}^N E_{i,c}^{*,V} &= N+1. \end{aligned} \quad (4.4.16)$$

que se pueden resolver numéricamente. Para calcular la solución que bifurca de V_c , supondremos $\forall i = 0, \dots, N$ el desarrollo en escalas múltiples habitual en una bifurcación de Hopf:

$$\begin{aligned} E_i(t; \varepsilon) &= E_{i,c}^* + \varepsilon E_i^{(1)}(t, T) + \varepsilon^2 \left[E_i^{(2)}(t, T) + \varphi E_{i,c}^{*,V} \right] + \varepsilon^3 E_i^{(3)}(t, T) + O(\varepsilon^4) \\ J(t; \varepsilon) &= J_c^* + \varepsilon J^{(1)}(t, T) + \varepsilon^2 \left[J^{(2)}(t, T) + \varphi J_c^{*,V} \right] + \varepsilon J^{(3)}(t, T) + O(\varepsilon^4) \end{aligned} \quad (4.4.17)$$

donde $T = \varepsilon^2 t$. Elegimos esta escala lenta del tiempo de forma que se puedan eliminar los términos seculares que aparecen por primera vez en las ecuaciones para $E^{(3)}$. Ponemos:

$$a_i^{m,n,p} = \left(\frac{\partial^{m+n+p} J_{i \rightarrow i+1}}{\partial^m E_{i-1} \partial^n E_i \partial^p E_{i+1}} \right)_{\mathbf{E}=\mathbf{E}_c^*}, \quad \gamma_c = -\frac{\sigma E_{N,c}^*}{\nu}, \quad \eta_c = \frac{J_c^*}{E_{N,c}^*} + \frac{\sigma E_{N,c}^*}{\nu}.$$

Insertando (4.4.17) en (3.7.2) - (3.7.6) e igualando en potencias de ε , obtenemos la siguiente jerarquía de ecuaciones:

$O(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_i^{(1)}}{\partial t} + a_i^{1,0,0} E_{i-1}^{(1)} + a_i^{0,1,0} E_i^{(1)} + a_i^{0,0,1} E_{i+1}^{(1)} - J^{(1)} &= 0, \quad i = 1, \dots, N-1, \\ J^{(1)} - \frac{\partial E_0^{(1)}}{\partial t} &= \sigma E_0^{(1)}, \\ J^{(1)} - \frac{\partial E_N^{(1)}}{\partial t} &= \gamma_c E_{N-1}^{(1)} + \eta_c E_N^{(1)}, \\ \sum_{i=0}^N E_i^{(1)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

$O(\varepsilon^2)$:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial E_i^{(2)}}{\partial t} + a_i^{1,0,0} E_{i-1}^{(2)} + a_i^{0,1,0} E_i^{(2)} + a_i^{0,0,1} E_{i+1}^{(2)} - J^{(2)} = \\
& -\frac{1}{2} \left[a_i^{2,0,0} (E_{i-1}^{(1)})^2 + a_i^{0,2,0} (E_i^{(1)})^2 + a_i^{0,0,2} (E_{i+1}^{(1)})^2 \right] - a^{1,1,0} E_{i-1}^{(1)} E_i^{(1)} - \\
& a^{1,0,1} E_{i-1}^{(1)} E_{i+1}^{(1)} - a^{0,1,1} E_i^{(1)} E_{i+1}^{(1)}, \quad i = 1, \dots, N-1, \\
& J^{(2)} - \frac{\partial E_0^{(2)}}{\partial t} = \sigma E_0^{(2)}, \quad (4.4.19) \\
& J^{(2)} - \frac{\partial E_N^{(2)}}{\partial t} = \gamma_c E_{N-1}^{(2)} + \eta_c E_N^{(2)} + \sigma E_N^{(1)} \left(\frac{E_N^{(1)} - E_{N-1}^{(1)}}{\nu} \right), \\
& \sum_{i=0}^N E_i^{(2)} = 0.
\end{aligned}$$

$O(\varepsilon^3)$:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial E_i^{(3)}}{\partial t} + a_i^{1,0,0} E_{i-1}^{(3)} + a_i^{0,1,0} E_i^{(3)} + a_i^{0,0,1} E_{i+1}^{(3)} - J^{(3)} = -\frac{\partial E_i^{(1)}}{\partial T} - a_i^{2,0,0} E_{i-1}^{(1)} (E_{i-1}^{(2)} + \varphi E_{i-1,c}^{*,V}) - \\
& a_i^{0,2,0} E_i^{(1)} (E_i^{(2)} + \varphi E_{i,c}^{*,V}) - a_i^{0,0,2} E_{i+1}^{(1)} (E_{i+1}^{(2)} + \varphi E_{i+1,c}^{*,V}) - a_i^{1,1,0} [E_{i-1}^{(1)} (E_i^{(2)} + \varphi E_{i,c}^{*,V}) + \\
& E_i^{(1)} (E_{i-1}^{(2)} + \varphi E_{i-1,c}^{*,V})] - a_i^{1,0,1} [E_{i-1}^{(1)} (E_{i+1}^{(2)} + \varphi E_{i+1,c}^{*,V}) + E_{i+1}^{(1)} (E_{i-1}^{(2)} + \varphi E_{i-1,c}^{*,V})] - \\
& a_i^{0,1,1} [E_i^{(1)} (E_{i+1}^{(2)} + \varphi E_{i+1,c}^{*,V}) + E_{i+1}^{(1)} (E_i^{(2)} + \varphi E_{i,c}^{*,V})] - \frac{1}{6} [a_i^{3,0,0} (E_{i-1}^{(1)})^3 + a_i^{0,3,0} (E_i^{(1)})^3 + \\
& a_i^{0,0,3} (E_{i+1}^{(1)})^3] - \frac{1}{2} [a_i^{2,1,0} (E_{i-1}^{(1)})^2 E_i^{(1)} + a_i^{2,0,1} (E_{i-1}^{(1)})^2 E_{i+1}^{(1)} + a_i^{1,2,0} (E_i^{(1)})^2 E_{i-1}^{(1)} + \\
& a_i^{0,2,1} (E_i^{(1)})^2 E_{i+1}^{(1)} + a_i^{1,0,2} (E_{i+1}^{(1)})^2 E_{i-1}^{(1)} + a_i^{0,1,2} (E_i^{(1)}) (E_{i+1}^{(1)})^2] - \\
& a_i^{1,1,1} E_{i-1}^{(1)} E_i^{(1)} E_{i+1}^{(1)}, \quad i = 1, \dots, N-1, \\
& J^{(3)} - \frac{\partial E_0^{(3)}}{\partial t} = \sigma E_0^{(3)}, \\
& J^{(3)} - \eta_c E_N^{(3)} - \gamma_c E_{N-1}^{(3)} - \frac{\partial E_N^{(3)}}{\partial t} = \frac{\partial E_N^{(1)}}{\partial T} + \frac{\sigma}{\nu} E_N^{(1)} (2E_{N,c}^{*,V} - E_{N-1,c}^{*,V}) + \gamma_c E_{N-1}^{(1)} + \\
& \frac{2\sigma}{\nu} E_N^{(1)} E_N^{(2)} - \frac{\sigma}{\nu} (E_N^{(1)} E_{N-1}^{(2)} + E_N^{(2)} E_{N-1}^{(1)}) \\
& \sum_{i=0}^N E_i^{(3)} = 0. \quad (4.4.20)
\end{aligned}$$

Resolvemos ahora estos sistemas de ecuaciones diferenciales y apliquemos la condición de no resonancia (4.4.13) cuando nos encontraremos con términos proporcionales a $e^{\pm i\omega t}$.

Las solución de (4.4.18) nos dan la solución linealizada:

$$\begin{aligned}
E_i^{(1)}(t, T) &= A(T) e^{i\omega t} \xi_i + c.c. \quad i = 0, \dots, N \\
J^{(1)}(t, T) &= A(T) e^{i\omega t} + c.c.
\end{aligned} \quad (4.4.21)$$

donde c.c. significa el complejo conjugado del término anterior y ξ_i es la solución de (4.3.9) - (4.3.12) correspondiente al autovalor $\lambda = i\omega$, es decir, es el autovector asociado al autovalor que cruz el eje imaginario en $V = V_c$. Insertando (4.4.21) en (4.4.19) obtenemos

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial E_i^{(2)}}{\partial t} + a_i^{1,0,0} E_{i-1}^{(2)} + a_i^{0,1,0} E_i^{(2)} + a_i^{0,0,1} E_{i+1}^{(2)} - J^{(2)} = \\
& -|A|^2 [a_i^{2,0,0} |\xi_{i-1}|^2 + a_i^{0,2,0} |\xi_i|^2 + a_i^{0,0,2} |\xi_{i+1}|^2 + a_i^{1,1,0} \text{Re}(\xi_{i-1} \bar{\xi}_i) + a_i^{1,0,1} \text{Re}(\xi_{i-1} \bar{\xi}_{i+1}) \\
& + a_i^{0,1,1} \text{Re}(\xi_i \bar{\xi}_{i+1})] - A^2 e^{2i\omega t} [\xi_{i-1}^2 + \xi_i^2 + \xi_{i+1}^2 + \xi_{i-1} \xi_i + \xi_{i-1} \xi_{i+1} + \xi_i \xi_{i+1}] + c.c., \\
& i = 1, \dots, N-1, \\
& J^{(2)} - \frac{\partial E_0^{(2)}}{\partial t} - \sigma E_0^{(2)} = 0, \\
& J^{(2)} - \frac{\partial E_N^{(2)}}{\partial t} - \gamma_c E_{N-1}^{(2)} - \eta_c E_N^{(2)} = \\
& \frac{\sigma}{\nu} [|A|^2 (|\xi_N|^2 - 2\text{Re}(\xi_N \bar{\xi}_{N-1})) + A^2 e^{2i\omega t} (\xi_N^2 - \xi_N \xi_{N-1}) + c.c.] , \\
& \sum_{i=0}^N E_i^{(2)} = 0.
\end{aligned} \tag{4.4.22}$$

Aquí tampoco hay términos resonantes; buscamos una solución del tipo

$$\begin{aligned}
E_i^{(2)}(t, T) &= \alpha_{0,i} |A(T)|^2 + \alpha_{2,i} A(T)^2 e^{2i\omega t} + c.c. \quad i = 0, \dots, N \\
J^{(2)}(t, T) &= \beta_0 |A(T)|^2 + \beta_2 A(T)^2 e^{2i\omega t} + c.c.
\end{aligned} \tag{4.4.23}$$

Insertando (4.4.23) en (4.4.22) e igualando los términos proporcionales a $|A|^2$ y a $A^2 e^{2i\omega t}$, se obtienen para las $(2N+4)$ incógnitas $\{\alpha_{0,i}, \alpha_{2,i}, \beta_0, \beta_2\}$, $i = 0, \dots, N$ las siguientes ecuaciones con las condiciones de contorno y la condición del bias:

- Términos proporcionales a $|A|^2$:

$$\begin{aligned}
a_i^{1,0,0} \alpha_{0,i-1} + a_i^{0,0,1} \alpha_{0,i+1} - \beta_0 &= -[a_i^{2,0,0} |\xi_{i-1}|^2 + a_i^{0,2,0} |\xi_i|^2 + a_i^{0,0,2} |\xi_{i+1}|^2 + \\
& a_i^{1,1,0} \text{Re}(\xi_{i-1} \bar{\xi}_i) + a_i^{1,0,1} \text{Re}(\xi_{i-1} \bar{\xi}_{i+1}) + a_i^{0,1,1} \text{Re}(\xi_i \bar{\xi}_{i+1})], \\
\beta_0 &= \sigma \alpha_{0,0}, \quad \beta_0 - \gamma_c \alpha_{0,N} = \frac{\sigma}{\nu} (|\xi_N|^2 - 2\text{Re}(\xi_N \bar{\xi}_{N-1})) \\
& \sum_{i=0}^N \alpha_{0,i} = 0.
\end{aligned} \tag{4.4.24}$$

- Términos proporcionales a $A^2 e^{2i\omega t}$:

$$\begin{aligned}
2i\omega\alpha_{2,i} + a_i^{1,0,0}\alpha_{2,i-1} + a_i^{0,1,0}\alpha_{2,i} + a_i^{0,0,1}\alpha_{2,i+1} - \beta_2 &= -(\xi_{i-1}^2 + \xi_i^2 + \xi_{i+1}^2 + \\
&\quad \xi_{i-1}\xi_i + \xi_i\xi_{i+1} + \xi_{i-1}\xi_{i+1}), \\
\beta_2 = (2i\omega + \sigma)\alpha_{2,0}, \quad \beta_2 - 2i\omega\alpha_{2,N} - \gamma_c\alpha_{2,N-1} - \eta_c\alpha_{2,N} &= \frac{\sigma}{\nu}(\xi_N^2 - \xi_N\xi_{N-1}), \\
\sum_{i=0}^N \alpha_{2,i} &= 0.
\end{aligned}
\tag{4.4.25}$$

Resolviendo (4.4.24) y (4.4.25) tenemos la solución a orden $O(\varepsilon^2)$, pero nos queda por conocer $A(T)$. La función de amplitud resultará de introducir las soluciones a orden $O(\varepsilon)$ y $O(\varepsilon^2)$ en las ecuaciones (4.4.20), y aplicar luego la condición de no resonancia (4.4.13). Efectivamente, en este proceso encontramos que los términos resonantes (proporcionales a $e^{i\omega t}$) que aparecen son:

$$\begin{aligned}
& -\xi_i \frac{dA}{dT} - \varphi [(\xi_{i-1} + \xi_i + \xi_{i+1})(E_{i-1,c}^{*,V} + E_{i,c}^{*,V}) + E_{i+1,c}^{*,V}] A - \\
& [\alpha_{0,i-1}(a_i^{2,0,0}\xi_{i-1} + a_i^{1,1,0}\xi_i + a_i^{1,0,1}\xi_{i+1}) + \alpha_{0,i}(a_i^{0,2,0}\xi_i + a_i^{1,1,0}\xi_{i-1} + a_i^{0,1,1}\xi_{i+1}) + \\
& \alpha_{0,i+1}(a_i^{0,0,2}\xi_{i+1} + a_i^{1,0,1}\xi_{i-1} + a_i^{0,1,1}\xi_i) + \alpha_{2,i-1}(a_i^{0,0,2}\bar{\xi}_{i-1} + a_i^{1,1,0}\bar{\xi}_i + a_i^{1,0,1}\bar{\xi}_{i+1}) + \\
& \alpha_{2,i}(a_i^{0,2,0}\bar{\xi}_i + a_i^{1,1,0}\bar{\xi}_{i-1} + a_i^{0,1,1}\bar{\xi}_{i+1}) + \alpha_{2,i+1}(a_i^{0,0,2}\bar{\xi}_{i+1} + a_i^{1,0,1}\bar{\xi}_{i-1} + a_i^{0,1,1}\bar{\xi}_i) + \\
& \frac{1}{2}(a_i^{3,0,0}\xi_{i-1}|\xi_{i-1}|^2 + a_i^{0,3,0}\xi_i|\xi_i|^2 + a_i^{0,0,3}\xi_{i+1}|\xi_{i+1}|^2) + Re(\xi_{i-1})Re(\xi_i)(a_i^{1,2,0}\xi_i + a_i^{2,1,0}\xi_{i-1}) + \\
& Re(\xi_i)Re(\xi_{i+1})(a_i^{0,1,2}\xi_{i+1} + a_i^{0,2,1}\xi_i) + Re(\xi_{i-1})Re(\xi_{i+1})(a_i^{1,0,2}\xi_{i+1} + a_i^{2,0,1}\xi_{i-1}) + \\
& a_i^{1,1,1}(\bar{\xi}_{i-1}\xi_i\xi_{i+1} + \xi_{i-1}\bar{\xi}_i\xi_{i+1} + \xi_{i-1}, \xi_i\bar{\xi}_{i+1})] A |A|^2 \\
& i = 1, \dots, N-1,
\end{aligned}
\tag{4.4.26}$$

mientras las condiciones de contorno nos dan:

$$\begin{aligned}
g_0 &= 0, \\
g_N &= -\xi_N \frac{dA}{dT} + \left[\frac{\sigma}{\nu} \xi_N (2E_{N,c}^{*,V} - E_{N-1,c}^{*,V}) - \gamma_c \xi_{N-1} \right] A + A |A|^2 \frac{\sigma}{\nu} [\alpha_{0,N}(\xi_{N-1} - 2\xi_N) + \\
& \quad \alpha_{2,N}(\bar{\xi}_{N-1} - 2\bar{\xi}_N) + \alpha_{0,N-1}\xi_{N-1} + \alpha_{2,N-1}\bar{\xi}_{N-1}].
\end{aligned}
\tag{4.4.27}$$

Finalmente, aplicando la *condición de no-resonancia* (4.4.13) obtenemos

$$\frac{dA}{dT} = \varphi \zeta_1 A - \zeta_2 A |A|^2,
\tag{4.4.28}$$

donde

$$\zeta_1 = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle (M + i\omega I)^{-1} \rangle_{ij} c_{1j}}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle (M + i\omega I)^{-1} \rangle_{ij} \xi_j}, \quad (4.4.29)$$

$$\zeta_2 = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle (M + i\omega I)^{-1} \rangle_{ij} c_{2j}}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle (M + i\omega I)^{-1} \rangle_{ij} \xi_j} \quad (4.4.30)$$

y c_{1j} , c_{2j} son los coeficientes de A y $|A|^2$, respectivamente. Se puede probar, de forma análoga a lo que se hizo en [8], que $\zeta_1 = (\partial\lambda/\partial V)_{V=V_c}$. Entonces, $Re(\zeta_1) > 0$ en V_α y $Re(\zeta_1) < 0$ en V_β .

(4.4.28) es la ecuación de amplitud que queríamos hallar. Esta ecuación tiene la solución periódica

$$A(T) = R e^{i\varphi\theta(T-T_0)}, \quad (4.4.31)$$

con

$$T_0 = c.te, \quad R = \sqrt{\frac{\varphi Re(\zeta_1)}{Re(\zeta_2)}}, \quad \theta = Im(\zeta_1) - \frac{Im(\zeta_2)Re(\zeta_1)}{Re(\zeta_2)}. \quad (4.4.32)$$

La estabilidad de $A(T)$ depende sólo del signo de $Re(\zeta_2)$, ya que $\varphi Re(\zeta_2) > 0$ en V_α y en V_β . Si $Re(\zeta_2) > 0$ y $V = V_\alpha$, entonces una órbita periódica estable y de radio R bifurca de V_α hacia $V > V_\alpha$ (la solución estacionaria es estable si $V < V_\alpha$ e inestable si $V > V_\alpha$). En este caso tenemos una bifurcación de Hopf supercrítica. Si por el contrario $Re(\zeta_2) < 0$ y $V = V_\alpha$, la rama de soluciones oscilatorias bifurca hacia $V < V_\alpha$ y la bifurcación de Hopf es subcrítica. El caso $V = V_\beta$ es parecido.

4.5. Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado los estados estacionarios de nuestro modelo y su estabilidad; del estudio de la estabilidad lineal hemos deducido la presencia de puntos de bifurcación de Hopf cerca de las extremidades superiores de las ramas I-V y con un método de escalas múltiples hemos hallado la ecuación de amplitud de nuestro sistema, con la que hemos calculado el punto donde la bifurcación de Hopf cambia de supercrítica a subcrítica. Además, la frecuencia de las oscilaciones puede sintonizarse variando el voltaje, y depende también de los demás parámetros del sistema (curva $v(E)$, densidad de dopaje y condiciones de contorno).

Capítulo 5

Estudio numérico del modelo y de la dinámica de recolocación debida a sweeping del voltaje

5.1. Introducción

En este Capítulo vamos a explorar con un extenso estudio numérico la respuesta dinámica a cambios del voltaje en superredes semiconductoras, usando el modelo detallado en el Cap. 3. Así haciendo, vamos a encontrar oscilaciones auto-sostenidas de la corriente cerca de las extremidades de las ramas estacionarias estables de la curva característica I–V. Estas oscilaciones se deben al reciclaje periódico de dipolos de carga cerca del cátodo que desaparecen dentro de la superred, antes que puedan alcanzar el ánodo. Queremos también investigar como la respuesta dinámica del sistema a un cambio de voltaje depende del número de ramas multi-estables de la característica I–V, de su extensión y del tiempo de *ramping* (i.e. el tiempo necesario para pasar de un voltaje a otro) necesario para cambiar voltaje (de V_i a V_f).

Entre nuestros resultados, vamos a encontrar un escenario de tripolo–dipolo distinto de lo encontrado en [1]. Además, encontraremos que el tiempo de *ramping* selecciona el escenario de dipolo/tripolo para grandes saltos del voltaje. Suponemos que hay muchas ramas de la característica I–V en el intervalo entre V_i y V_f (cambios de voltaje grandes). Entonces, existen dos tiempos críticos de *ramping* τ_{c1} y τ_{c2} , $\tau_{c2} < \tau_{c1}$, cuyos valores exactos dependen de los parámetros de la superred en la Tabla 3.1. Para los parámetros usados en las simulaciones, los tiempos críticos de *ramping* están entre 10 y 30 μs .

Si el tiempo de *ramping* es mayor de τ_{c1} , la corriente sigue adiabáticamente las ramas estables hasta sus extremidades, cae a la próxima rama estable y repite el proceso hasta

cuando V_f es alcanzado.

Para tiempos de *ramping* entre τ_{c2} y τ_{c1} , al movimiento adiabático sobre una rama estable sucede un escenario de dipolo-tripolo hasta cuando la siguiente rama estable es alcanzada. Según el número de ramas multi-estables, a veces una rama estable es saltada. En fin, si el tiempo de *ramping* es más pequeño de τ_{c2} , la rama estable final es alcanzada después un sólo escenario de dipolo-tripolo para cambios de voltaje aún más grandes.

5.2. El método numérico

El problema que tenemos que resolver es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma $d\mathbf{E}/dt = \mathbf{F}(\mathbf{E}(t))$, donde $F_i(\mathbf{E}) = J(t) - J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}(t), E_i(t), E_{i+1}(t))$, que debe resolverse junto con una condición inicial y la condición del bias:

$$\frac{dE_i(t)}{dt} = J(t) - J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}(t), E_i(t), E_{i+1}(t)), \quad i = 0, \dots, N, \quad (5.2.1)$$

$$E_i(0) = V(0), \quad i = 0, \dots, N \quad (5.2.2)$$

$$\sum_{i=0}^N E_i(t) = (N+1)V(t). \quad (5.2.3)$$

Sumando (5.2.1) desde $i = 0$ hasta $i = N$ y usando (5.2.3) se obtiene una expresión explícita para la corriente $J(t)$:

$$J(t) = \frac{dV}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}(t), E_i(t), E_{i+1}(t)). \quad (5.2.4)$$

Entonces, resolver el sistema (5.2.1) - (5.2.3) equivale a resolver el sistema siguiente junto con la misma condición inicial, que verifica la condición del bias (5.2.3):

$$\begin{aligned} \frac{dE_i(t)}{dt} &= \frac{dV}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{j=0, j \neq i}^N J_{j \rightarrow j+1}(E_{j-1}(t), E_j(t), E_{j+1}(t)) \\ &\quad - \frac{N}{N+1} J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}(t), E_i(t), E_{i+1}(t)), \quad i = 0, \dots, N, \\ E_i(0) &= V(0), \quad i = 0, \dots, N. \end{aligned}$$

En efecto, se puede recuperar el sistema inicial sumando estas ecuaciones desde $i = 0$ hasta $i = N$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\sum_{i=0}^N E_i(t) - (N+1)V(t) \right] &= \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(\sum_{j=0, j \neq i}^N J_{j \rightarrow j+1}(E_{j-1}(t), E_j(t), E_{j+1}(t)) \right) \\ &\quad - \frac{N}{N+1} \sum_{i=0}^N E_i(t) = 0 \quad \text{si se desarrolla el doble sumatorio,} \end{aligned}$$

luego $\sum_{i=0}^N E_i(t) = (N+1)V(t)$ más una constante, que es nula, porque se debe cumplir la condición de contorno. Ambas formulaciones son por lo tanto equivalentes.

5.2.1. Euler explícito

El método de Euler explícito se escribe como $E_i^{n+1} = E_i^n + \Delta t F_i(\mathbf{E}^n)$. Escrito en detalle, esto es

$$E_i^{n+1} = E_i^n + \Delta t \left[\frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{j=0, j \neq i}^n J_{j \rightarrow j+1}(E_{j-1}^n, E_j^n, E_{j+1}^n) - \frac{N}{N+1} J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}^n, E_i^n, E_{i+1}^n) \right], \quad i = 0, \dots, N,$$

donde se muestran los tiempos en los que las variables son evaluadas. Se puede resolver con el algoritmo siguiente:

1. Cálculo de $J_T^n(i) := J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}^n, E_i^n, E_{i+1}^n)$, $i = 0, \dots, N$.
2. Cálculo de $J^n = \frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N J_T^n(i)$.
3. Construcción de $E_i^{n+1} = E_i^n + \Delta t [J^n - J_T^n(i)]$.
4. Cálculo de $J^{n+1} = \frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}^{n+1}, E_i^{n+1}, E_{i+1}^{n+1})$.
5. Representación de la solución (t^{n+1}, J^{n+1}) y (t^{n+1}, i, E_i^{n+1}) ; **n=n+1; goto 1.**

NOTA: En el paso 2, J^n no es la corriente en el tiempo t^n porque dV/dt está evaluada en el tiempo t^{n+1} . La razón de evaluar esta función en este instante de tiempo es que es el que corresponde en la ecuación exacta el instante t^{n+1} . Siendo la función $V(t)$ conocida $\forall t$, hay que usar el valor exacto; no por ello el método va a ser *más implícito*.

5.2.2. BDF-1: Euler implícito

El método BDF de orden 1 es el Euler implícito: $E_i^{n+1} = E_i^n + \Delta t F_i(\mathbf{E}^{n+1})$, i.e.

$$E_i^{n+1} = E_i^n + \Delta t \left[\frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{j=0, j \neq i}^N J_{j \rightarrow j+1}(E_{j-1}^{n+1}, E_j^{n+1}, E_{j+1}^{n+1}) \right] \quad (5.2.5)$$

$$- \frac{N}{N+1} J_{i \rightarrow i+1}(E_{i-1}^{n+1}, E_i^{n+1}, E_{i+1}^{n+1}) \Big], \quad i = 0, \dots, N. \quad (5.2.6)$$

Este sistema debe resolverse mediante un proceso iterativo como el método de Newton-Raphson aplicado al sistema $\mathbf{G}(\mathbf{y}) = 0$, en el que $\mathbf{G}(\mathbf{y}) = \mathbf{y} - \mathbf{y}^0 - \Delta t \mathbf{F}(\mathbf{y})$ viene dada por

$$G_i(\mathbf{y}) = y_i - y_i^0 - \Delta t \left[\frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{j=0, j \neq i}^N J_{j \rightarrow j+1}(y_{j-1}, y_j, y_{j+1}) \right] \quad (5.2.7)$$

$$- \frac{N}{N+1} J_{i \rightarrow i+1}(y_{i-1}, y_i, y_{i+1}) \Big], \quad (5.2.8)$$

donde el vector $\mathbf{y}^0 = \mathbf{E}^n$ sirve de estimación inicial para las iteraciones de Newton en la iteración temporal $t^n \rightarrow t^{n+1}$:

$$\mathbf{y}^{l+1} = \mathbf{y}^l - [\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{y}^l)]^{-1} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{y}^l), \quad (5.2.9)$$

donde $\mathbf{J}_{\mathbf{G}}$ es la matriz jacobiana de \mathbf{G} : $[\mathbf{J}_{\mathbf{G}}]_{i,j} = \partial G_i / \partial y_j$, y l es el índice de las iteraciones de Newton. Es de esperar que para l suficientemente grande se alcance una solución válida tal que $|\mathbf{G}(\mathbf{y}^l)| < \text{TOL}$. Entonces, $\mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{y}^l$.

5.2.3. BDF-2, 3 y 4

Los cuatro primeros BDFs son de la forma siguiente:

$$y^{n+1} - y^n = \Delta t F(y^{n+1}), \quad (5.2.10)$$

$$\frac{3}{2}y^{n+1} - 2y^n + \frac{1}{2}y^{n-1} = \Delta t F(y^{n+1}), \quad (5.2.11)$$

$$\frac{11}{6}y^{n+1} - 3y^n + \frac{3}{2}y^{n-1} - \frac{1}{3}y^{n-2} = \Delta t F(y^{n+1}), \quad (5.2.12)$$

$$\frac{25}{12}y^{n+1} - 4y^n + 3y^{n-1} - \frac{4}{3}y^{n-2} + \frac{1}{4}y^{n-3} = \Delta t F(y^{n+1}). \quad (5.2.13)$$

Se resuelven con un algoritmo general parecido al expuesto para el BDF-1, con la salvedad de que los BDF- k con $k > 1$ requieren un proceso previo para calcular $k - 1$ condiciones iniciales además de y^0 . Aparte de eso, basta con una ligera modificación para adaptar G_i y $\partial G_i / \partial y_j$.

5.2.4. Detalles del algoritmo

Para el BDF-1 los elementos de la matriz $\mathbf{J}_{\mathbf{G}}$ son de la forma

$$\frac{\partial G_i(\mathbf{y}^l)}{\partial y_j} = \frac{\partial}{\partial y_j} \left[y_i^l - y_i^0 - \Delta t \left(\frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{k=0, k \neq i}^N J_{k \rightarrow k+1}(y_k^l) \right. \right. \quad (5.2.14)$$

$$\left. \left. - \frac{N}{N+1} J_{i \rightarrow i+1}(y_i^l) \right) \right], \quad (5.2.15)$$

luego

$$\frac{\partial G_i(\mathbf{y}^l)}{\partial y_j} = \begin{cases} 1 + \frac{N\Delta t}{N+1} \frac{\partial J_{j \rightarrow j+1}(y_j^l)}{\partial y_j}, & \text{si } j = i, \\ -\frac{\Delta t}{N+1} \frac{\partial J_{j \rightarrow j+1}(y_j^l)}{\partial y_j}, & \text{si } j \neq i. \end{cases} \quad (5.2.16)$$

Esto es, las columnas son constantes excepto en la diagonal; se puede construir esta matriz haciendo

do j=0,N

$$\alpha_j = -\frac{\Delta t}{N+1} \frac{\partial J_{j \rightarrow j+1}(y_j^l)}{\partial y_j}, \text{ que se evalua numéricamente}$$

do i=0,N

$$[\mathbf{J}_{\mathbf{G}}]_{i,j} = \alpha_j$$

enddo

$$[\mathbf{J}_{\mathbf{G}}]_{j,j} = 1 - N\alpha_j$$

enddo

Para hacer las iteraciones de Newton en (5.2.9) se obtiene el vector $\mathbf{b} = [\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{y}^l)]^{-1} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{y}^l)$ resolviendo el sistema

$$\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{y}^l) \cdot \mathbf{b} = \mathbf{G}(\mathbf{y}^l). \quad (5.2.17)$$

Entonces, la iteración de Newton es una simple resta de vectores conocidos:

$$\mathbf{y}^{l+1} = \mathbf{y}^l - \mathbf{b}. \quad (5.2.18)$$

El algoritmo para pasar de (\mathbf{E}^n, J^n) a $(\mathbf{E}^{n+1}, J^{n+1})$ es el siguiente:

1. Definir $\mathbf{y}^0 = \mathbf{E}^n$; $l = 0$.
2. Con \mathbf{y}^l , obtener J^l :
 - a) Calcular la carga correspondiente a \mathbf{y}^l mediante Poisson: $n_i^l = \frac{y_i^l - y_{i-1}^l}{\nu} + 1$, $i = 1, \dots, N$,
 - b) Calcular $J_T^l(i) = J_{i \rightarrow i+1}(y_i^l; n_i^l, n_{i-1}^l)$, $i = 1, \dots, N$
 - c) Sumar $J^l = \frac{dV(t^{n+1})}{dt} + \frac{1}{N+1} \sum_{j=0}^N J_T^l(i)$.
3. Construir $G_i(\mathbf{y}^l) = y_i^l - y_i^0 - \Delta t[J^l - J_T^l(i)]$ y hacer el test $|\mathbf{G}(\mathbf{y}^l)| < \text{TOL}$. Si falla, hay que hacer una iteración de Newton, pasos 4 y 5, y volver a 2. Si no falla, **goto** 7.
4. Construir el vector \mathbf{b} :
 - a) Evaluar numéricamente $\left. \frac{\partial J_{i \rightarrow i+1}(y)}{\partial y} \right|_{y_i^l} \approx \frac{J_{i \rightarrow i+1}(y_i^l + \epsilon, n_i^l, n_{i-1}^l) - J_{i \rightarrow i+1}(y_i^l - \epsilon, n_i^l, n_{i-1}^l)}{2\epsilon}$,
 - b) Construir $\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{y}^l)$ con (5.2.16),
 - c) Resolver $\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{y}^l) \cdot \mathbf{b} = \mathbf{G}(\mathbf{y}^l)$, mediante descomposición LU, por ejemplo (es un sistema pequeño: 41x41).

5. Construir $\mathbf{y}^{l+1} = \mathbf{y}^l - \mathbf{b}$.
6. $l=l+1$; goto 2.
7. $\mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{y}^l$, $J^{n+1} = J^l$. Entonces, $n=n+1$; goto 1.

5.2.5. Sobre el rendimiento de los BDF

Los valores típicos del campo eléctrico están contenidos en $E_i \in (0, 20)$. Para estos valores, el valor de $\partial J_{j \rightarrow j+1}(y)/\partial y$ resulta ser muy pequeño; está contenido $(-0, 18, 1, 35)$, luego acotado por 1.4.

En la expresión (5.2.16), este valor se divide por $N + 1 = 41$ y se multiplica por $\Delta t = 10^{-2}$, típicamente, lo cual da una cota para $\alpha_j = 3,4 \times 10^{-4}$ en el algoritmo de construcción de la matriz jacobiana $\mathbf{J}_{\mathbf{G}}$. Así, esta matriz resulta ser una ligera perturbación de la matriz identidad. Además, menor es Δt , menor es la perturbación.

Poniendo $\mathbf{J}_{\mathbf{G}} = \mathbf{I}$, las iteraciones de Newton quedan como $\mathbf{y}^{l+1} = \mathbf{y}^l - \mathbf{G}(\mathbf{y}^l)$, i.e.

$$y_i^{l+1} = y_i^0 + \Delta t F_i(\mathbf{y}^l), \quad (5.2.19)$$

lo cual muestra que el BDF-1 es equivalente a iterar el Euler explícito en cada iteración temporal hasta cumplir el test $|\mathbf{G}| < \text{TOL}$. Este proceso sigue siendo implícito mientras las iteraciones se detengan con un test como éste.

En el caso del BDF-2, $\mathbf{J}_{\mathbf{G}} \approx 3\mathbf{I}/2$, luego

$$\frac{3}{2}y_i^{l+1} = 2y_i^0 - \frac{1}{2}y_i^1 - \Delta t F_i(\mathbf{y}^l). \quad (5.2.20)$$

De nuevo esto son iteraciones muy rápidas, con una aproximación de E_i^{n+1} mejor que las anteriores, aunque hace uso de dos condiciones iniciales.

Nota importante: En el cálculo de la derivada de $J_{i \rightarrow i+1}$ respecto de E_i hay que tener en cuenta que n_i y n_{i+1} están en la expresión de $J_{i \rightarrow i+1}$ y dependen de E_i :

$$\frac{\partial n_i}{\partial E_i} = \frac{1}{\nu}, \quad \frac{\partial n_{i+1}}{\partial E_i} = -\frac{1}{\nu}.$$

De hecho:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_{i \rightarrow i+1}}{\partial E_i}(E_i, n_i, n_{i+1}) &= \frac{\partial v(E_i)}{\partial E_i} \frac{J_{i \rightarrow i+1}}{v(E_i)} + a\rho_0 v(E_i) \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-aE_i} \left(e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0}} - 1 \right)} \right) \\ &+ v(E_i) \left(\frac{\partial n_i}{\partial E_i} - \frac{e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0} - aE_i}}{1 + e^{-aE_i} \left(e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0}} - 1 \right)} \frac{\partial n_{i+1}}{\partial E_i} \right). \end{aligned}$$

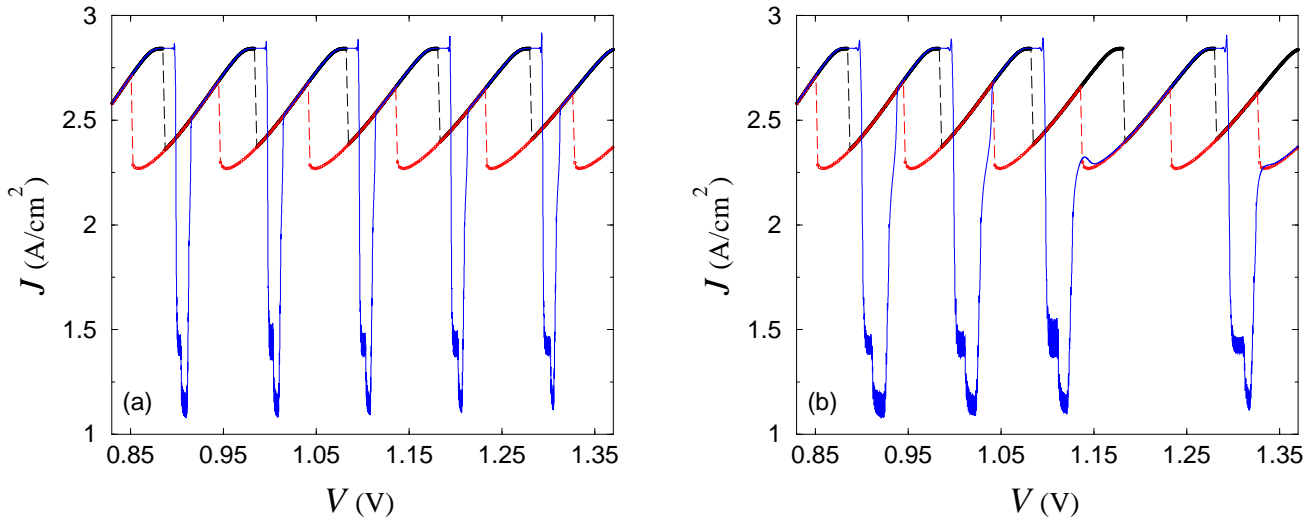


Figura 5.1: Densidad de corriente total durante sweeping de $V_i = 0,83\text{V}$ a $V_f = 1,37\text{V}$ (siete ramas) con tiempos de ramping: (a) $\tau_r = 30\mu\text{s}$ (valor adimensional: $\tilde{\tau}_r = 2 \times 10^4$), y (b) $\tau_r = 15\mu\text{s}$ ($\tilde{\tau}_r = 10^4$). Línea gruesa negra: parte superior de las ramas I-V, línea fina roja: parte inferior de las ramas I-V, línea fina azul: itinerario de la curva $(V(t), J(t))$. En (a), la corriente sigue adiabáticamente la curva I-V, mientras en (b) el tiempo de ramping es tan pequeño que la 4^{ta} y la 6^{ta} rama son saltadas. La conductividad adimensional del cátodo es $\tilde{\sigma} = 0,5$.

Por lo tanto, hay que añadir a la aproximación numérica el valor siguiente:

$$\frac{v(E_i)}{\nu} \left(1 + \frac{e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0} - aE_i}}{1 + e^{-aE_i} \left(e^{\frac{n_{i+1}}{\rho_0}} - 1 \right)} \right). \quad (5.2.21)$$

Aunque no es una cantidad despreciable (que por lo tanto tenemos en cuenta en nuestro algoritmo), las pruebas numéricas muestran que se puede eliminar este valor sin que el método de Newton se resienta.

5.3. Sweeping largo: evolución de $J(V)$ a lo largo de la curva I-V

En esta sección vamos a describir la respuesta dinámica de la superred a un sweeping del voltaje $V(t) = V_i + \Delta V t H(\tau_r - t)/\tau_r + \Delta V H(t - \tau_r)$, donde ΔV es constante y $H(t) = 1$ si $t > 0$, $H(t) = 0$ si $t < 0$ es la función de Heaviside. Escogemos el voltaje inicial en la parte central de una rama y el voltaje final $V_f = V_i + \Delta V$ en partes distintas de otra

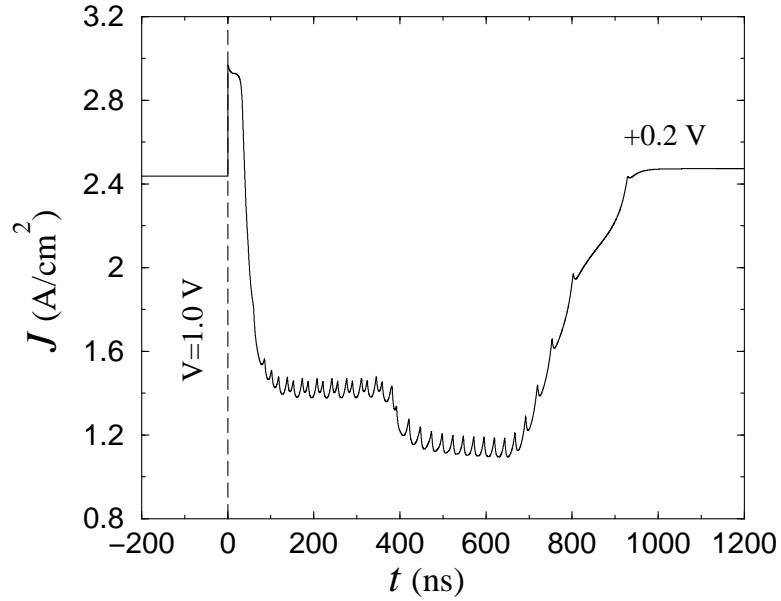


Figura 5.2: Densidad de corriente total J en función del tiempo después switching del voltaje con escenario de tripolo-dipolo. $V_i = 1,0$ V (para $t < 0$) and $\Delta V = 0,2$ V.

rama estable, para que se puedan encontrar muchas ramas estables entre V_i y V_f . Hemos encontrado distintos escenarios.

5.3.1. Sweeping partiendo de ramas biestables: escenario de dipolo-tripolo modificado

Escogemos $V_i = 0,83$ V, en la parte central monoestable de la rama B_8 y $V_f = 1,37$ V, en la parte central de la rama B_{14} . Estas dos ramas son biestables pero tienen una parte central de monoestabilidad. La Fig. (5.1) muestra la respuesta dinámica de la densidad de corriente total $J(t)$ al sweeping del voltaje con dos distintos tiempos de ramping. Para tiempos de ramping suficientemente largos (que no enseñamos aquí) la densidad de corriente $J(t)$ sigue adiabáticamente la curva característica I-V. Para tiempos de ramping antes de un primer valor crítico, $J(t)$ no puede alcanzar la extremidad superior de las ramas y cae a la parte inferior de la siguiente rama en el rango de voltaje donde las dos ramas son estables. *Para cada rama saltada*, esta caída pasa por el siguiente escenario de dipolo-tripolo modificado, como se ve en el gráfico de la corriente dibujado en la Fig. 5.2:

Fase 1: La acumulación de carga que separa los dominios de campo alto y bajo se queda en el mismo pozo mientras la densidad de corriente crece hasta que sobrepasa el valor crítico para el cual $J = \sigma F$ cruza la curva de la Fig. (3.1) $J = J_{i \rightarrow i+1}(F, N_D, N_D)$

sobre su segunda rama ($J_c \approx 2,9 \text{ A/cm}^2$).

- Fase 2: El cátodo suelta una onda de dipolo de carga que se mueve hacia el ánodo mientras la vieja acumulación de carga se mueve también en dirección del ánodo. Después de un breve transitorio durante el cual la corriente baja, toda la estructura, un *tripolo de carga*, se mueve rígidamente hacia el ánodo.
- Fase 3: La vieja acumulación de carga alcanza el ánodo dejando el dipolo de carga en movimiento (después de un breve transitorio durante el cual la corriente decrece más) rígidamente hacia el ánodo con una velocidad más baja del tripolo.
- Fase 4: La parte frontal del dipolo, un agotamiento de carga, alcanza el ánodo dejando sólo la acumulación de carga por detrás. La densidad de corriente sube a valores más grandes correspondientes a la próxima solución estacionaria estable mientras la acumulación de carga se mueve hacia su destino final que separa los dominios de campo alto y bajo del perfil de campo eléctrico estacionario.

La fase 2 está caracterizada por una serie de *spikes* a doble pico (correspondientes a los saltos de un pozo a otro de las dos acumulaciones de carga), mientras las fases 3 y 4 exhiben *spikes* monopico; ver Fig. (5.2).

Las fases 2, 3 y 4 son exactamente como descrito en [1] (que no describe la fase 4) y correcto en [27] (que añade la fase 4). En los trabajos antecedentes, la fase 1 se caracterizaba con el movimiento de la acumulación de carga de un solo pozo hacia el cátodo. nótese que las observaciones experimentales se refieren solo al comportamiento de la densidad de corriente, no al movimiento de los dominios de carga, entonces no pueden discriminar entre nuestra Fase 1 y la otra de [1]. Para explicar las diferencias en la Fase 1, notamos que según la Fig. 6.2 una acumulación de carga puede moverse en contra del flujo de los electrones si la corriente es grande y la densidad de dopaje es suficientemente grande.

De todas formas, la corriente crítica para este movimiento sería exponencialmente cerca a la corriente máxima para que la acumulación de carga existe si la densidad de dopaje es todavía más grande, eliminando en práctica la posibilidad que una acumulación de carga se pueda mover contracorriente bajo corriente constante. En las simulaciones de Amann *et al.* el intervalo de corriente que permitía el movimiento en contra del flujo de los electrones era bastante ancho, mientras hemos encontrado que es insignificante para la corriente túnel y la densidad de dopaje de nuestras simulaciones. Entonces el aumento de voltaje debido al switching está compensado simplemente con un aumento de la corriente en la fase 1, sin movimiento de la acumulación de carga, como indica la Fig. 5.2. Cuando la corriente sobrepasa su valor crítico (ver el pico de la corriente por encima del valor máximo de la corriente para las ramas estacionarias de Fig. 5.1), empieza la fase 2: el cátodo suelta un

dipolo que se mueve hacia el ánodo junto con la vieja acumulación de carga. Ésta y las siguientes fases son como en los trabajos [1] y [27]. El comportamiento de la corriente se puede explicar usando ideas de perturbaciones singulares como se ha hecho en [4] y [6]. Conforme el voltaje va creciendo, la acumulación de carga se posiciona más cerca del cátodo y eso es el motivo para que el viaje del dipolo-tripolo en la superred es más breve, como se ve en la Fig. 5.1.

Hemos visto que haciendo *sweeping* entre B_8 y B_{14} tenemos una sucesión de escenarios de dipolo-tripolo. Que va a pasar si seguimos disminuyendo el tiempo de ramping? Lo que ocurre es que empezamos a saltar ramas. Nótese que el proceso de dipolo-tripolo es bastante rápido en Fig. 5.1 y termina con un voltaje más pequeño del intervalo de biestabilidad cerca de la extremidad de la correspondiente rama de la curva I-V.

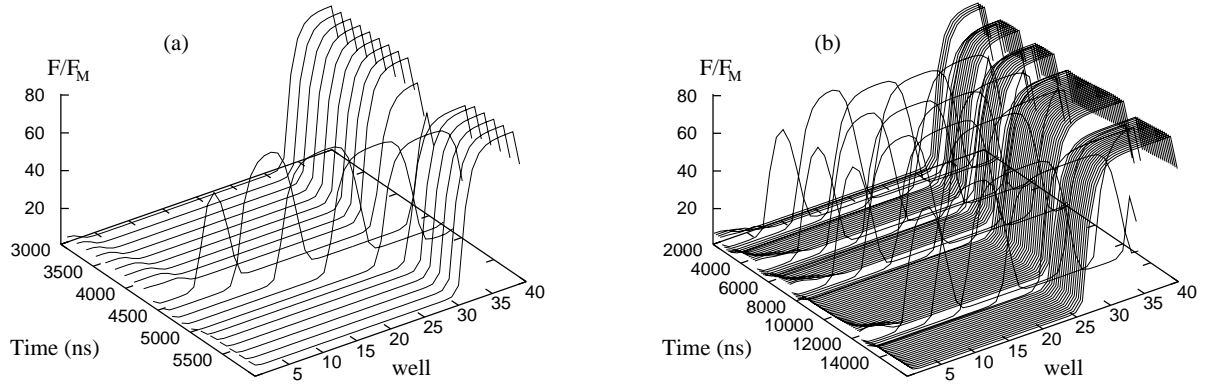


Figura 5.3: Perfiles de los campos correspondientes a la Fig. 5.1 durante la recolocación del dominio de campo eléctrico. (a) Detalle de la emisión y del viaje de la acumulación de carga durante la segunda fase de la recolocación en Fig. 5.1(a). (b) La 4^{ta} rama en Fig. 5.1(b) ha sido saltada, entonces la 4^{ta} acumulación de carga falta y no hay fase de recolocación.

Para aquel valor del voltaje, solo una rama es estable y $J(t)$ sigue esta rama estable hasta la próxima emisión de dipolo. De todas formas, mientras el voltaje va creciendo, los intervalos de biestabilidad crecen a expensas de los rangos centrales monoestables de las ramas. Cuando el tiempo de ramping decrece bajo un cierto valor crítico (que depende de la rama), el voltaje al final de un proceso de emisión de dipolo y de su viaje en la superred puede estar en el rango de biestabilidad de dos ramas. Entonces, la acumulación de carga del dipolo se para en una posición correspondiente a la rama estacionaria con corriente inferior que es más cerca al cátodo de la acumulación de carga de la rama con corriente mayor. Esto se puede observar en la Fig. 5.1(b). Nótese que las ramas B_{11} y B_{14} han sido

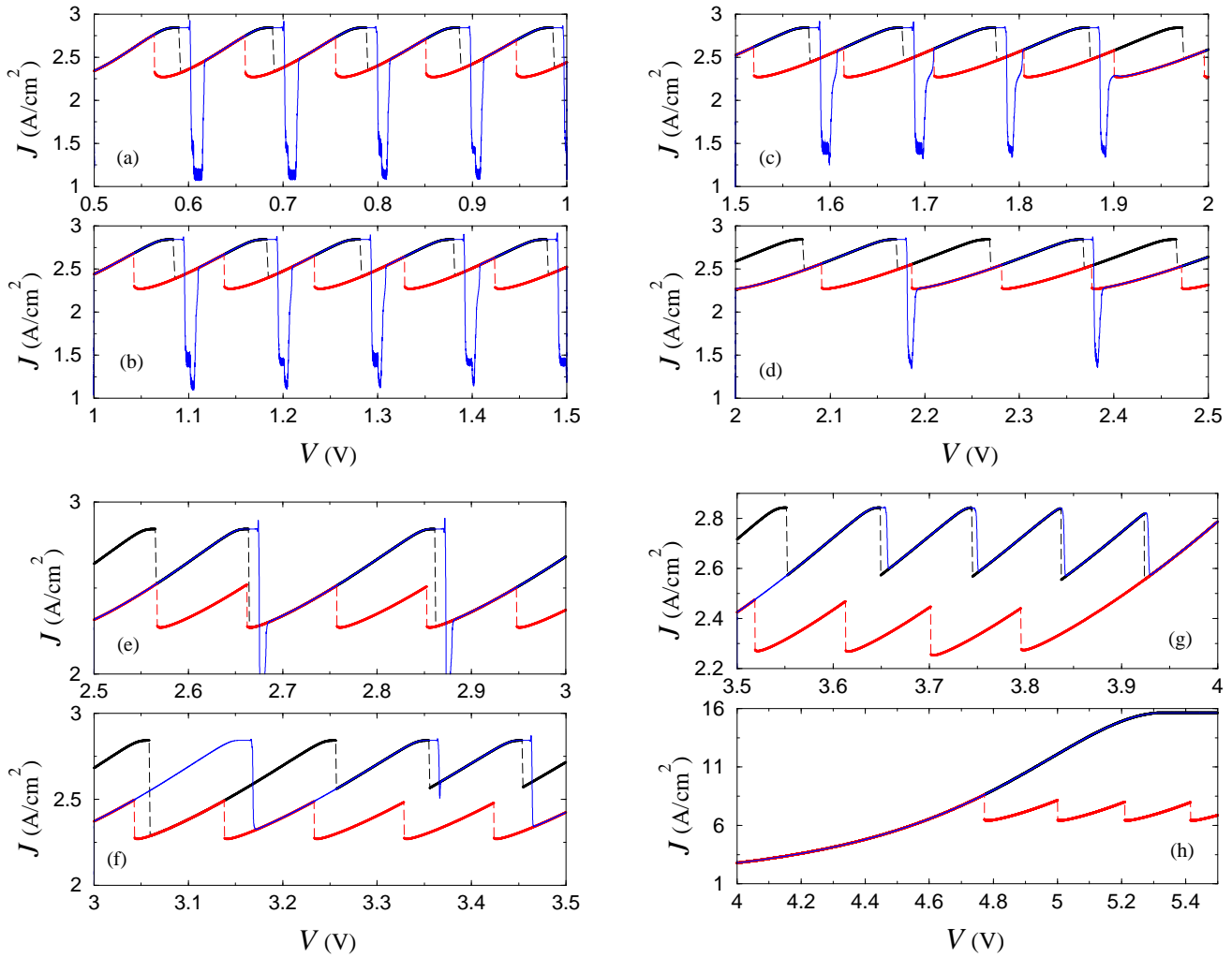


Figura 5.4: Sweeping del voltaje con $\Delta V = 0,5$ V y tiempo de ramping $\tau_r = 30 \mu s$ para distintos V_i sobre la característica I-V: (a) $V_i = 0,5$ V, (b) $V_i = 1$ V, (c) $V_i = 1,5$ V, (d) $V_i = 2$ V, (e) $V_i = 2,5$ V, (f) $V_i = 3$ V, (g) $V_i = 3,5$ V, (h) $V_i = 4$ V, $\Delta V = 1,5$ V. En (a), (b), (g) y (h), la corriente sigue la curva I-V sobre la parte superior de cada rama, mientras J varía entre 6 y 16 A/cm². En (c), se salta una rama (la 5^{ta}) por primera vez. En (d) y (e), las ramas 3 y 5 son saltadas. En (f), la parte superior de la 5^{ta} rama es alcanzada pero la 6^{ta} es saltada.

saltadas. La Fig. 5.3(b) muestra que el correspondiente proceso de dipolo-tripolo es más largo cuando se salta una rama.

5.3.2. Mismo rango de sweeping para ramas biestables y triestables

Está claro de cuanto dicho antes que los intervalos de biestabilidad tienen una gran influencia sobre la respuesta dinámica al sweeping del voltaje. Para aclarar este punto, hemos dibujado en las Fig. 5.4(a) - 5.4(h) la respuesta dinámica al sweeping del voltaje de anchura $\Delta V = 0,5$ V con tiempo de ramping $\tau_r = 30\mu s$ (como en Fig. 5.1(a)) y distintos voltajes iniciales V_i . Observamos que el escenario de dipolo-tripolo ocurre para V_i pequeño, se empiezan a saltar ramas cuando V_i crece y el escenario de dipolo-tripolo desaparece para voltajes todavía más grandes donde el rango de triestabilidad de las ramas es muy ancho. Claramente, la eventualidad de que ocurra un escenario de dipolo-tripolo depende del tiempo de ramping: aparece otra vez en cuanto el tiempo de ramping disminuye suficientemente.

5.4. Sweeping del voltaje a V_f cerca de la extremidad superior de las ramas

En esta sección vamos a describir la respuesta dinámica al sweeping del voltaje de V_i a V_f cerca de la extremidad superior de la misma rama. Primero, seleccionamos las ramas cerca del final del plateau, que eran las únicas consideradas en [1]. Segundo, consideramos las ramas cerca del inicio del plateau y observamos un comportamiento bastante distinto.

5.4.1. Valores altos del voltaje cerca del final del plateau

La Fig. 5.5 muestra la respuesta de la corriente al sweeping del voltaje de V_i en el rango de biestabilidad de la rama B_{37} , cerca de su extremidad superior. Dejando un tiempo de ramping de 100 ns, observamos un comportamiento parecido a lo observado por Amann *et al.* en [1]:

- (i) Si $V_f < V_{th}$ (final de la rama estacionaria) la corriente se queda en la misma rama y el tiempo que necesita para llegar a su valor final crece conforme V_f se acerca a V_{th} .
- (ii) Si $V_f > V_{th}$ el estado final es sobre la próxima rama, y el estado transitorio dura más a medida que nos acercamos a V_{th} , ver Fig. 5.6(a).

De la misma manera, cuanto más largo es el tiempo de ramping, más largo parece ser el transitorio antes de que la corriente caiga a la próxima rama estable I-V, como se muestra en la Fig. 5.6(b). Esta figura muestra como el tiempo de ramping afecta la respuesta de

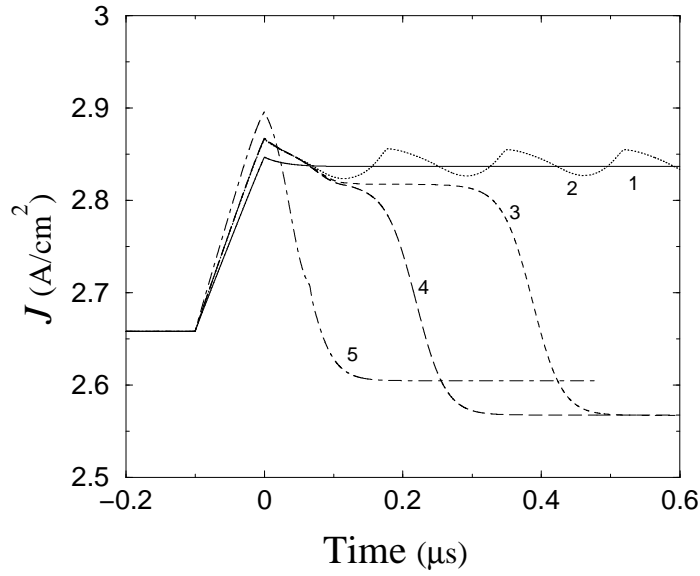


Figura 5.5: Respuesta de la corriente al sweeping del voltaje de $V_i = 3,68$ V a cinco valores de V_f cerca de V_{th} (1: 3.74, 2: 3.747, 3: 3.7472732, 4: 3.7474 y 5: 3.76 V). El tiempo de ramping es $\tau_r = 100$ ns y hemos puesto $t = 0$ al final del sweeping. Nótese el comportamiento oscilatorio para $V_f = 3,747$ V.

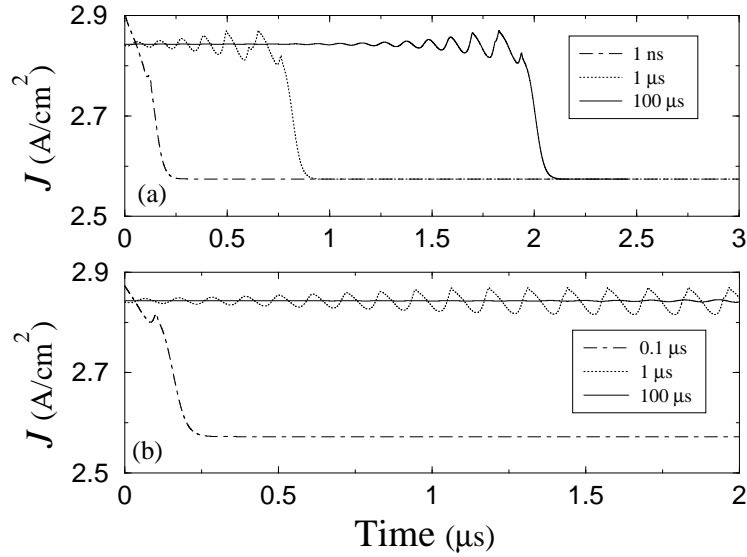


Figura 5.6: Respuesta de la corriente al sweeping del voltaje de $V_i = 3,5$ V a dos distintos valores de V_f y tres distintos tiempos de ramping en cada caso: (a) $V_f = 3,555$ V $> V_{th}$, con $\tau_r = 1$ ns, $1 \mu s$ y $100 \mu s$. (b) $V_f = 3,5545$ V $< V_{th}$, con $\tau_r = 0,1 \mu s$, $1 \mu s$ and $100 \mu s$. En todos los casos hemos puesto $t = 0$ al final del sweeping. Para $\tau_r = 100 \mu s$, la corriente experimenta oscilaciones de pequeña amplitud en el caso de Fig. 5.6(b).

la corriente al sweeping del voltaje con V_f cerca de V_{th} para las ramas I-V cerca del final del plateau.

Ahora seleccionamos B_{35} y cambiamos el tiempo de ramping de pequeño a grande para dos distintos V_f cerca de V_{th} , uno más grande y el otro más pequeño. Para $V_f > V_{th}$, observamos que a la larga la corriente cae al valor más bajo en la rama B_{36} , pero el estado transitorio dura más conforme el tiempo de ramping crece. Para $V_f \approx V_{th}$, la cuenca de atracción de B_{35} es tan pequeña que la corriente a la larga cae a su valor final en la rama B_{36} . De todas formas, la manera en que todo esto ocurre depende fuertemente del tiempo de ramping:

- (i) Si el tiempo de ramping es demasiado pequeño, la corriente cae rápidamente y el estado final es sobre la rama B_{36} .
- (ii) Para tiempo de ramping intermedios, la corriente oscila cerca de la rama estacionaria B_{35} antes de caer a la rama B_{36} .
- (iii) Para tiempos de ramping largos, la corriente parece quedarse al valor en la rama estacionaria B_{35} y a la larga resiste mucho más, antes de caer a la rama B_{36} .

Una característica distinta de la respuesta de la corriente al sweeping del voltaje con V_f cerca del final de una rama estacionaria es que, en el caso (i), el estado final estable para $V_f < V_{th}$ muy cerca a V_{th} puede ser oscilatorio, no estacionario.

Esta afirmación sigue de la observación de las Fig. 5.5 y 5.6 y del análisis de estabilidad lineal y no lineal que se ha desarrollado en el Capítulo 4.1. Ahí se muestra que la rama estacionaria pierde su estabilidad en $V_{osc} < V_{th}$ porque la parte real de dos autovalores complejos y conjugados se hace positiva para $V_{osc} < V < V_{th}$, como se vé claramente en la Fig. 4.3, que muestra los autovalores del problema de estabilidad lineal cerca de la rama estacionaria B_{35} para 20 distintos valores del voltaje cerca de V_{th} . Para esta rama, $V_{osc} \approx 3,5547$ V.

5.4.2. Sweeping del voltaje a valores bajos cerca de las extremidades superiores de las ramas

La Fig. 5.7 muestra que el sweeping cerca de la extremidades superiores de las ramas I-V del primer plateau a voltaje bajo es más complicado de lo que se ha descripto antes. En este caso, sucede que la caída de la corriente a la próxima rama puede ocurrir via el escenario de dipolo-tripolo, no como en las simulaciones numéricas de Amann *et al.* (que seleccionan siempre ramas estacionarias a voltaje alto que tienen intervalos de triestabilidad), pero conforme a las observaciones experimentales de Rogozia *et al.* (Fig. 9 de [27]). Otra discrepancia entre las simulaciones numéricas de [1] y los experimentos es que el pico

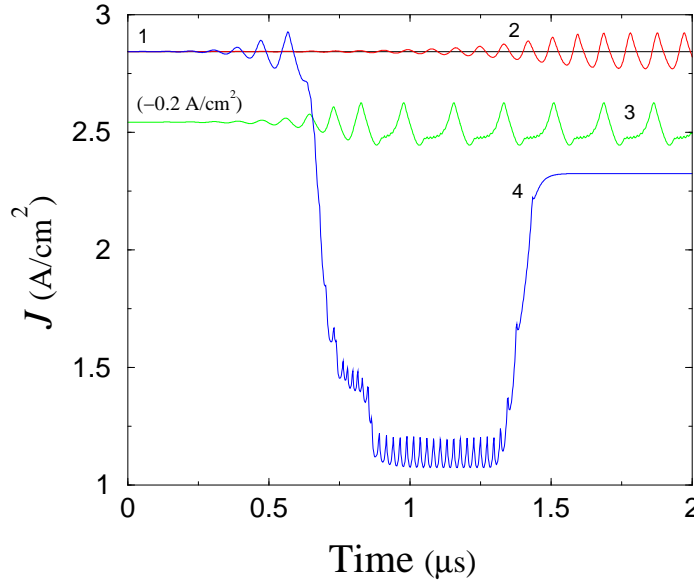


Figura 5.7: Respuesta de la corriente a sweeping del voltaje entre las ramas B_5 y B_6 de la característica I-V con $V_i = 0,56$ V, tiempo de ramping $\tau_r = 10 \mu s$ y cuatro valores distintos de V_f cerca de V_{th} : 1: 0.59, 2: 0.591, 3: 0.59203 y 4: 0.593 V. Nótese que hemos bajado la curva 3 de 0.2 A/cm^2 por claridad.

de corriente que acompaña la emisión del dipolo es mucho más alto que en las simulaciones (dos veces la corriente máxima de las ramas estacionarias en lugar del incremento de 20 % que se observa experimentalmente). En nuestras simulaciones el pico de la corriente que acompaña la emisión del dipolo es mucho más pequeño de lo encontrado en los cálculos de Amann *et al.*, aunque esto se debe a la distinta conductividad del cátodo y por lo tanto a la distinta corriente crítica para la creación del dipolo. La aparición del escenario de dipolo-tripolo durante el sweeping del voltaje ocurre hasta voltajes correspondientes a ramas que empiezan a mostrar triestabilidad. Si fijamos V_f lo suficiente cerca de V_{th} , con $V_f < V_{th}$, y cambiamos el tiempo de ramping, observamos un comportamiento peculiar. Para todos los tiempos de ramping, la recolocación de los dominios de campo, que separan las partes alta y baja de los perfiles del campo, ocurre via un escenario de dipolo-tripolo, como se ve en la Fig. 5.8(a). De todas formas, el tiempo t_d que ocurre para empezar el escenario de dipolo-tripolo no es una función monótona del tiempo de ramping: parece que t_d puede tener máximos y mínimos locales en función de τ_r . Hemos observado que t_d crece con τ_r hasta $\tau_r \approx 2,2 \mu s$. Luego t_d decrece con τ_r hasta como mínimo $7 \mu s$. Luego t_d crece otra vez para τ_r más grande, como se ve en la Fig. 5.8(a). Hemos comprobado que para un tiempo de ramping de $100 \mu s$ t_d es otra vez más pequeño que para $\tau_r = 30 \mu s$.

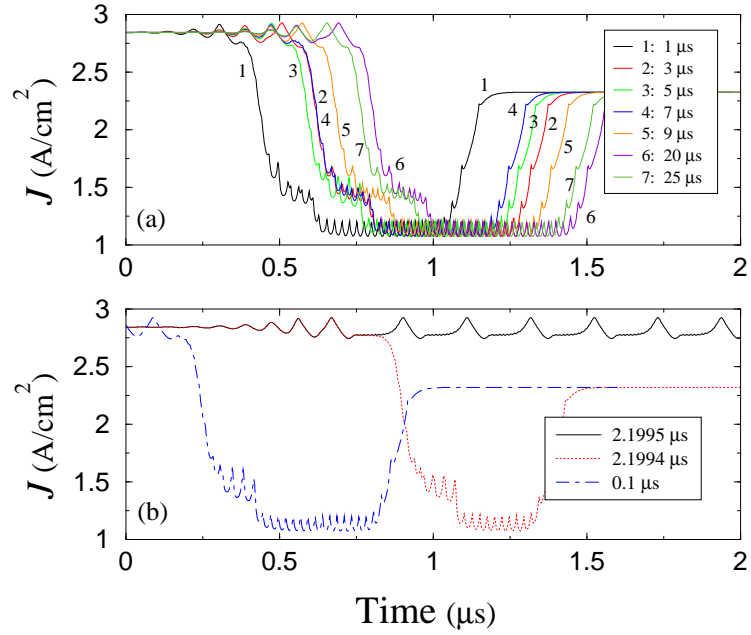


Figura 5.8: Respuesta de la corriente al sweeping del voltaje entre las ramas B_5 y B_6 de la característica I–V, con $V_i = 0,56$ V. (a) $V_f = 0,593$ V $> V_{th}$ y siete distintos tiempos de ramping de 1 a 25 μ s. (b) Detalles de la respuesta de la corriente para $V_f = 0,59203$ V $< V_{th}$ y tres tiempos de ramping cortos: 0.1, 2.1994 y 2.1995 μ s.

Para determinar la origen de este comportamiento no monótono de t_d como función del tiempo de ramping, observamos que, a medida que el voltaje crece con el tiempo, la corriente se hace oscilatoria antes de que empiece el escenario de dipolo–tripolo. La forma de las oscilaciones de la corriente y su período local también cambian a medida que el tiempo pasa, como se ve en las Fig. 5.7 y 5.8(b). Esta última figura muestra también que, para tiempos de ramping parecidos, la corriente puede caer a la rama I–V más baja o bien continuar a oscilar por un tiempo más largo. La Fig. 5.9 muestra el perfil del campo durante las oscilaciones de la corriente de la Fig. 5.8 para $V_f < V_{th}$. Se puede ver que las oscilaciones de la corriente dependen de la formación periódica de un pequeño impulso del campo en el cátodo y a su movimiento hacia el ánodo en unos pocos períodos de la superred antes de contraerse y desaparecer. A la larga, cuando el voltaje crece con el tiempo, un dipolo consigue destacarse de la región del cátodo y provoca un escenario de dipolo–tripolo, que baja la corriente a su valor estable en la próxima rama I–V. La Fig. 5.10 muestra que el mismo mecanismo es responsable de las oscilaciones de la corriente de pequeña amplitud para $V_f > V_{th}$.

El análisis de estabilidad lineal de las ramas estacionarias I–V nos da otra pista para entender lo que está pasando en el sweeping desde valores bajos del voltaje. Como se ve claramente en la Fig. 4.4, para voltajes bajos hay una inestabilidad de la solución

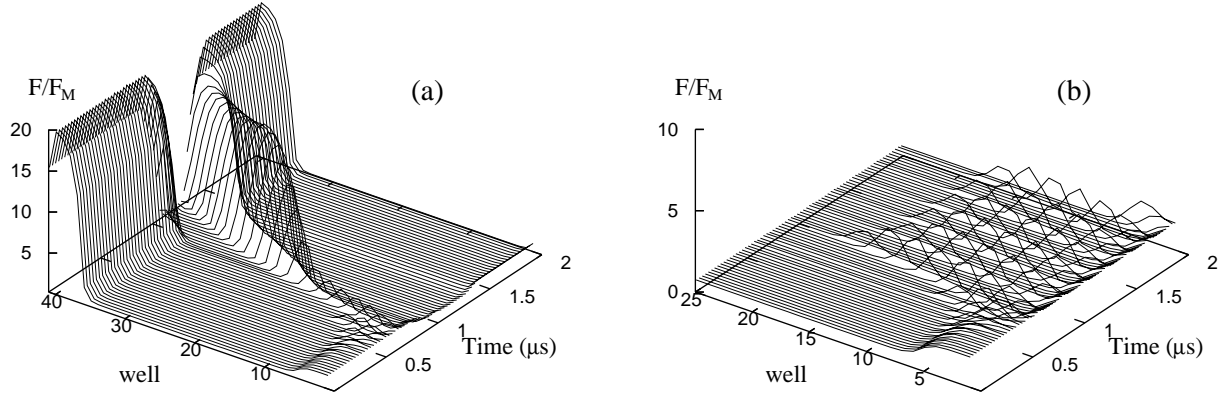


Figura 5.9: Evolución del perfil del campo eléctrico correspondiente a la Fig. 5.8(b), con $V_i = 0,56$ V y $V_f = 0,59203$ V $< V_{th}$, para los dos tiempos de ramping (muy parecidos) (a) $\tau_r = 2,1994$ μ s y (b) $\tau_r = 2,1995$ μ s. En (a), la acumulación de carga es emitida después un breve transitorio oscilatorio. En (b), una acumulación de carga es emitida desde el cátodo, desaparece en el interior de la muestra y este comportamiento se repite periódicamente, de manera parecida al efecto Gunn confinado en una parte de la superred.

estacionaria para $V < V_{th}$. En aquel voltaje, una rama estacionaria bifurca y esta segunda rama experimenta una bifurcación de Hopf, que hemos estudiado en el capítulo precedente. Los perfiles del campo eléctrico para estas soluciones oscilatorias corresponden a la emisión periódica de un pequeño impulso de campo (dipolo de carga) y a su movimiento cerca del cátodo.

Las Fig. 4.4(a) y 4.4(b) muestran que el autovalor que determina la estabilidad lineal de la rama estacionaria B_5 es real y se anula para un valor del voltaje más pequeño de V_{th} . Los autovalores con parte real grande que quedan son complejos y tienen parte real menor de cero. El *gap* que se observa en la Fig. 4.4(b) corresponde a la inestabilidad oscilatoria, aunque sería necesario un estudio más detallado para averiguar este tema. Entonces, se puede conjeturar la siguiente sucesión de bifurcaciones desde la rama estacionaria B_5 conforme el voltaje crece hacia V_{th} :

- (i) estable;
- (ii) rama estacionaria con oscilaciones de pequeña amplitud empezando en B_5 ;
- (iii) bifurcación de Hopf desde la rama estacionaria que bifurca;
- (iv) aniquilación de la oscilación antes o en V_{th} .

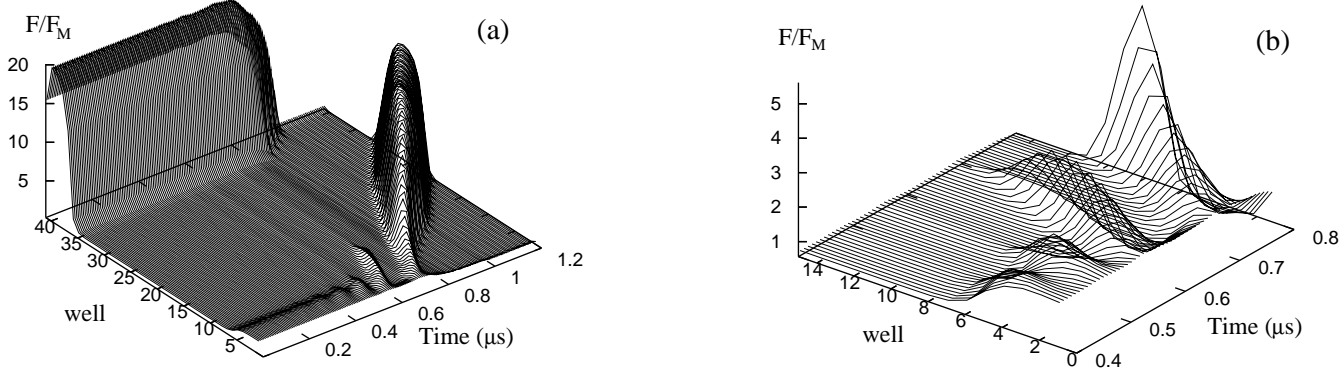


Figura 5.10: Evolución del perfil del campo eléctrico correspondiente a la curva número 6 de la Fig. 5.8(a), que tiene el intervalo oscilatorio más largo antes que una acumulación de carga sea emitida desde el cátodo (tiempo de ramping $\tau_r = 20\mu s$). (a) Detalle del regimen oscilatorio transitorio. (b) Detalle del perfil cerca del cátodo (15 pozos más cercanos) cuando la acumulación de carga es finalmente emitida.

Durante el sweeping del voltaje, la corriente pasa para esta sucesión de bifurcaciones y no hay razón para que el tiempo t_d tenga que ser una función monótona del tiempo de ramping t_d .

5.5. Conclusiones

En resumen, en este capítulo hemos analizado el estudio numérico del modelo y la respuesta del sistema a *sweeping* del voltaje. Hemos encontrado distintos escenarios de recolocación de los dominios de campo eléctrico y descrito el mecanismo con lo cual sucede la recolocación de los dominios. En el caso de sweeping muy largo, o sea cuando entre el voltaje inicial y el voltaje final están muchas ramas de la curva I-V, la recolocación de los dominios depende del tiempo de ramping: si es suficientemente largo, la corriente sigue adiabáticamente la curva I-V quedándose siempre en la rama más alta. Si en cambio es bastante breve, cada salto de rama es realizado via un escenario de dipolo-tripolo, parecido a los ya descritos en [1]: un agotamiento de carga se forma en el cátodo y se mueve hacia el ánodo produciendo una acumulación de carga por detrás. Junto con la vieja acumulación de carga, el *tripolo* de carga resultante se mueve hacia el ánodo hasta que la primera acumulación de carga y el agotamiento de carga llegan ahí. Entonces, la acumulación de carga que queda se mueve hasta llegar a su posición final. Para tiempos de ramping intermedios, y suponiendo que las ramas I-V tienen intervalos anchos de

biestabilidad, el escenario de dipolo–tripolo puede ser saltado para ocurrir en otros saltos de ramas. Si el voltaje final está cerca de la extremidad superior de las ramas, la corriente puede caer a la próxima rama estable, pero puede quedarse mucho tiempo sobre la rama estacionaria inicial (o bien puede oscilar a su alrededor en el caso que hay una inestabilidad oscilatoria) si el tiempo de ramping es suficientemente largo. El tiempo que el sistema necesita para empezar el escenario de dipolo–tripolo y estabilizar el valor de la corriente sobre la próxima rama I–V no es una función monótona del tiempo de ramping.

Capítulo 6

Movimiento de frentes de onda en superredes semiconductoras

6.1. Introducción

En la naturaleza hay una gran variedad de fenómenos que son bien modelizados como sistemas *discretos*, o sea *no continuos*. Entre ellos, están las superredes semiconductoras, que son sistemas complejos verdaderamente no lineales. De hecho, en ciertos regimenes de transporte no lineal los experimentos muestran patrones de sistemas espacialmente discretos (multiestabilidad de tantos estados estacionarios cuantos períodos de la superred, debida a la formación de dominios del campo eléctrico). En otros regimenes (oscilaciones periódicas auto-sostenidas y oscilaciones caóticas de la corriente) las superredes se portan de manera más parecida a los sistemas continuos. En el primer caso, la modelización se hace con ecuaciones de equilibrio discretas, mientras en el segundo las necesitamos continuas. En este capítulo vamos a estudiar como el ser un sistema discreto (N pozos y N barreras) afecta a nuestro sistema y su comportamiento dinámico global. Éste es un tema común en muchos campos: propagación de impulsos nerviosos en fibras de mielina, propagación de pulsos a través de células cardíacas, suelta de ondas de calcio en células vivientes, uniones de cadena de superconductores Josephson, cadenas de diodos resonadores acoplados, movimiento de dislocaciones en cristales y absorción de átomos sobre un sustrato periódico. Una característica propia de los sistemas discretos (que no comparten los sistemas continuos) es el anclaje de los frentes de onda (*pinning*): para valores del parámetro de control en un cierto intervalo, el frente de onda que une dos estados constantes se queda anclado. Cuando por otra parte supera un valor límite, el frente empieza a moverse otra vez (*depinning*). La existencia de ese valor límite es algo que se supone sea un hecho intrínsecamente discreto, que se pierde con la aproximación continua.

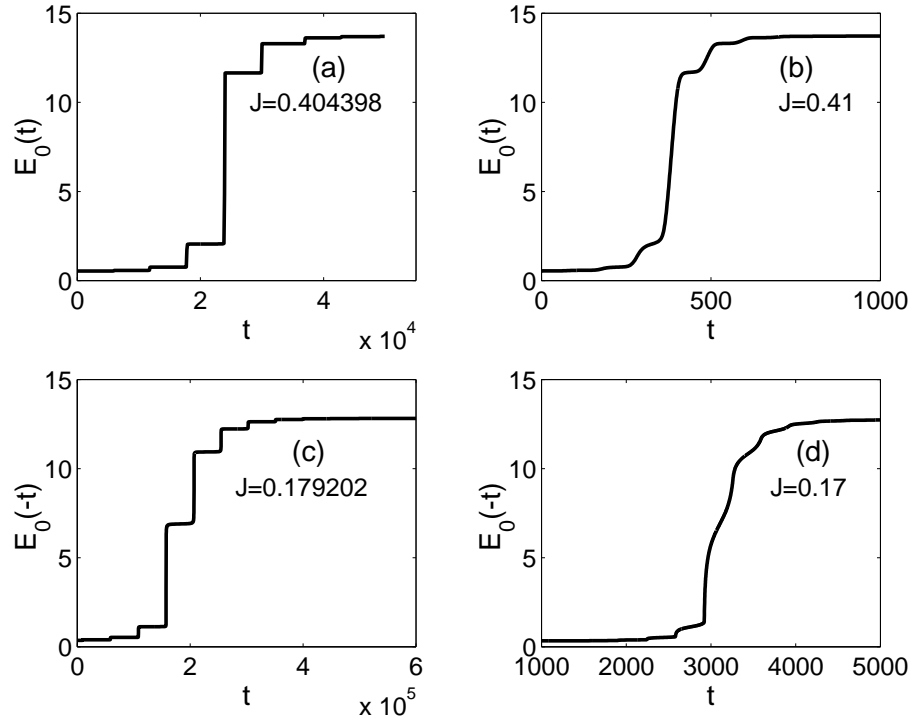


Figura 6.1: Desarrollo de escalones en el perfil del frente de onda conforme la corriente adimensional J se acerca al valor crítico para $\nu = 3$. (a) $J \approx J_2$, (b) $J > J_2$, (c) $J \approx J_1$, (d) $J < J_1$.

Consideramos entonces una superred infinitamente larga, bajo condiciones de densidad de corriente constante. Es decir, entre las ecuaciones de nuestro modelo la densidad de corriente total J va a ser un parámetro más, y no una variable. De esta manera la condición del bias sobra, y de hecho no está.

El dopaje adimensional ν tiene el papel de parámetro de control: el límite continuo es alcanzado cuando $\nu \rightarrow 0$. Para valores grandes de ν , estamos en el límite fuertemente discreto y los frentes de onda están anclados (*pinned*) para valores de J en un cierto intervalo $[J_1(\nu), J_2(\nu)]$. Si $J < J_1(\nu)$ el frente se mueve siguiendo el flujo de los electrones. Si en cambio $J > J_2(\nu)$ el frente se mueve contracorriente, en contra del flujo de los electrones.

Cuando el dopaje decrece, antes J_2 y despues J_1 (para valores del dopaje todavía mas pequeños) desaparecen. Esto quiere decir que los frentes pueden ser estacionarios o moverse en dirección de la corriente por debajo de un primer valor crítico de ν y se mueven siempre en dirección de la corriente por debajo de un segundo valor crítico de ν (ver Fig. 6.2). Puesto que el límite continuo corresponde al dopaje que se acerca a cero, frentes estacionarios y frentes que se mueven contracorriente son características de superredes discretas,

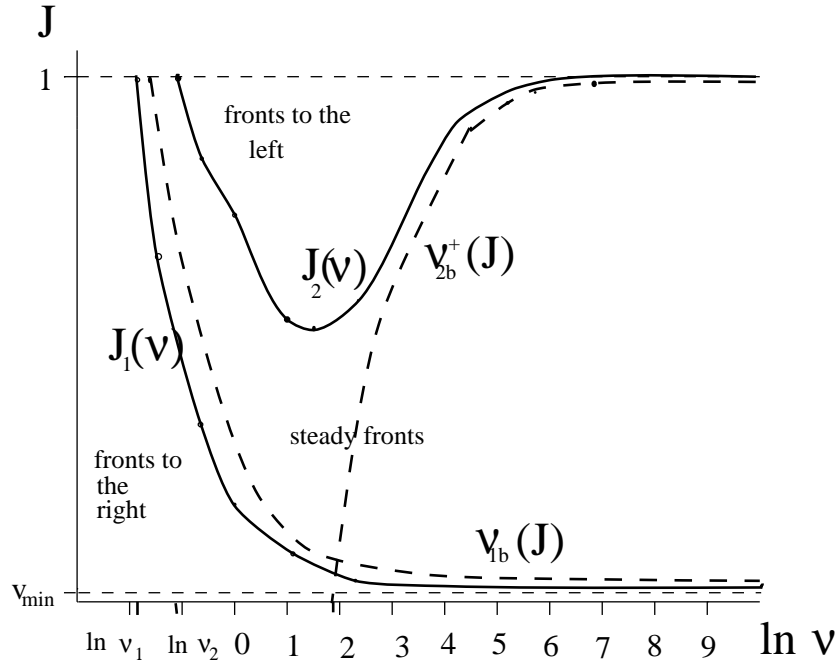


Figura 6.2: Corrientes críticas J_1 y J_2 en función del dopaje adimensional ν . De [13]

que se pierden en el límite continuo.

Por contraste con las repentinas caídas y subidas de la corriente y del campo eléctrico durante el movimiento de los frentes de onda, veremos que para valores de J fuera del intervalo $(J_1(\nu), J_2(\nu))$ los frentes se pueden describir como perfiles continuos que se mueven a velocidad constante. A medida que nos acercamos a una de las corrientes críticas J_i desde el intervalo donde los frentes se propagan, el perfil de los mismos desarrolla unos escalones y se hace discontinuo en $J = J_i$ (ver Fig. 6.1). Con esto el frente queda anclado para $J_1 < J < J_2$. Cerca de J_i , la velocidad de los frentes es proporcional a $|J - J_i|^{\frac{1}{2}}$.

La clave de nuestra teoría de frentes es que hay unos pocos valores de E_i (los *pozos activos*) que difieren de una constante durante el movimiento del frente. Si estudiamos unas ecuaciones reducidas para estos pozos activos podemos describir el frente cerca de las corrientes críticas. Nuestra descripción empeora conforme el dopaje decrece y nos acercamos al límite continuo. De hecho, en este caso vamos a necesitar más pozos activos para obtener una descripción adecuada. Por fin, veremos que si el dopaje adimensional ν es suficientemente pequeño (y entonces estamos en el límite del continuo), los frentes de onda son esencialmente ondas de choque cuya velocidad obedece una expresión del tipo igualdad de áreas.

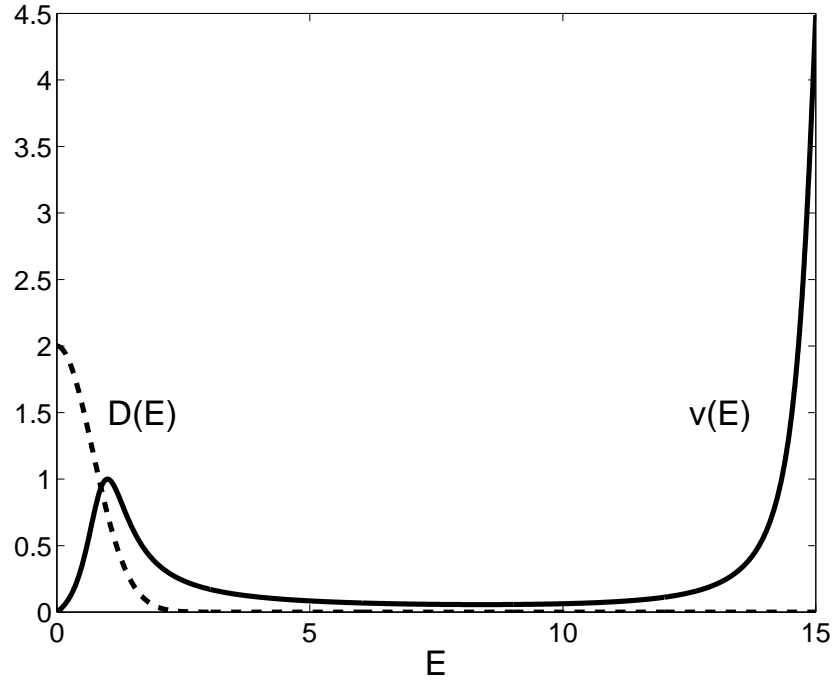


Figura 6.3: Velocidad de convección $v(E)$ y coeficiente de difusión $D(E)$ como funciones del campo eléctrico en unidades adimensionales.

6.2. Planteamiento del problema

Las ecuaciones del modelo que vamos a presentar a continuación son mas o menos las mismas del capítulo anterior, lo que cambia es que esta vez consideramos un sistema *under constant current conditions*, es decir, la densidad de corriente J juega el papel del campo externo. Además, suponemos que la densidad de corriente túnel $eJ_{i \rightarrow i+1}$ se pueda escribir como

$$J_{i \rightarrow i+1} = \frac{n_i v(F_i)}{l} - D(F_i) \frac{n_{i+1} - n_i}{l^2}, \quad (6.2.1)$$

donde la *velocidad de convección* $v(F)$ y el *coeficiente de difusión* $D(F)$ satisfacen respectivamente $v(-F) = -v(F)$ (es decir, v es impar) y $D(-F) = v(F)l + D(F)$. La forma típica de estos coeficientes (en unidades adimensionales) se puede ver en Fig. 6.3.

La fórmula (6.2.1) puede ser usada para temperaturas suficientemente altas (ver Apéndice A de [4]). Para comparar nuestros resultados teóricos con las soluciones numéricas del modelo, hemos utilizado aproximaciones analíticas de estas funciones (ver la Apéndice A).

Entonces tenemos, en el pozo i ,

$$F_i - F_{i-1} = \frac{e}{\varepsilon} (n_i - N_D^w),$$

$$\frac{\varepsilon}{e} \frac{dF_i}{dt} + J_{i \rightarrow i+1} = J(t).$$

La ley de Ampère correspondiente a la (6.2.1) es :

$$\frac{\varepsilon}{e} \frac{dF_i}{dt} + \frac{n_i v(F_i)}{l} - D(F_i) \frac{n_{i+1} - n_i}{l^2} = J(t). \quad (6.2.2)$$

Nótese que para campos grandes, prácticamente para todos los plateaus excepto el primero, el coeficiente de difusión es despreciable y tenemos entonces un modelo más simple, con $J_{i \rightarrow i+1} = n_i v(F_i)$ como en [6].

Para examinar el modelo, es mejor quitar las dimensiones. Haciendo como en 3.7 y cogiendo $v_M l$ como unidad para $D(F)$, tenemos, para la superred 9/4 de [22], $F_M = 6,92$ kV/cm, $N_D^w = 1,5 \times 10^{11}$ cm⁻², $v_M = 156$ cm/s, $v_M (d + w) = 2,03 \times 10^{-4}$ cm²/s y $e N_D^w v_M / (d + w) = 2,88$ A/cm². Las unidades de corriente y de tiempo son respectivamente 0.326 mA y 2.76 ns. Quitando las tildes queda:

$$\frac{dE_i}{dt} + v(E_i) n_i - D(E_i) (n_{i+1} - n_i) = J, \quad (6.2.3)$$

$$E_i - E_{i-1} = \nu (n_i - 1), \quad (6.2.4)$$

o bien, de manera equivalente,

$$\frac{dE_i}{dt} + v(E_i) \frac{E_i - E_{i-1}}{\nu} - D(E_i) \frac{E_{i+1} + E_{i-1} - 2E_i}{\nu} = J - v(E_i). \quad (6.2.5)$$

donde $\nu = e N_D^w / (\varepsilon F_M)$ es el parámetro de dopaje adimensional, $\nu \sim 3$ para el primer plateau de nuestra superred 9/4.

6.3. Plano de la estabilidad

Consideramos una superred infinita, bajo condiciones de densidad de corriente constante. Fijada $J \in (v_m, 1)$ (v_m es el mínimo de la función $v(E)$ entre las resonancias $C_1 C_1$ y $C_1 C_2$), una pequeña análisis de estabilidad lineal nos dice que la ecuación (6.2.5) tiene dos soluciones estacionarias espacialmente homogéneas estables, $E^{(1)}(J)$ y $E^{(3)}(J)$, y una inestable, $E^{(2)}(J)$, con $v(E^{(k)}) = J$ (ver Fig. 6.4).

Buscamos soluciones del modelo que cumplan $E_i \rightarrow E^{(1)}(J)$ cuando $i \rightarrow -\infty$ y $E_i \rightarrow E^{(3)}(J)$ cuando $i \rightarrow \infty$, que pueden ser estacionarias o bien dependientes del tiempo. Nuestras simulaciones numéricas muestran que cuando hay soluciones estas son frentes de

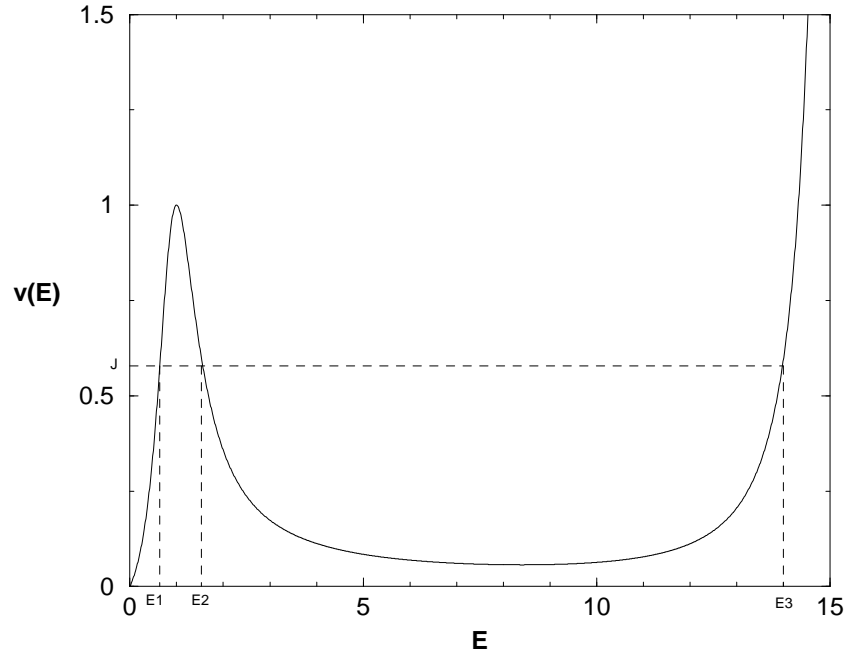


Figura 6.4: Fijada J , la ecuación (6.2.5) tiene las soluciones $E1$, $E2$ y $E3$

onda viajera que se mueven con velocidad constante $c = c(J, \nu)$ t.q. $E_i(t) = E(i - ct) \forall i = 0, \pm 1, \dots$ y donde $E(\tau)$ es un perfil regular solución del siguiente problema de autovalores para c y $E(\tau)$:

$$c \frac{dE}{d\tau} = v(E) - J + v(E) \frac{E - E(\tau - 1)}{\nu} - D(E) \frac{E(\tau + 1) + E(\tau - 1) - 2E}{\nu}, \quad (6.3.1)$$

$$E(-\infty) = E^{(1)}(J), \quad E(\infty) = E^{(3)}(J). \quad (6.3.2)$$

Usando un principio de comparación se puede probar rigurosamente la existencia de frentes estacionarios, como se ha hecho en [13]. Para valores de la corriente que no pertenecen al intervalo donde los frentes son estacionarios, se puede probar solo que hay frentes que se mueven a la dercha o a la izquierda. Además, se puede probar que frentes estacionarios y en movimiento no pueden coexistir para el mismo valor de la corriente [14].

La prueba del hecho que los frentes en movimiento son frentes de ondas viajeras es esencialmente numérica (ver Fig. 6.5); notamos también que todos los pasos notable, en Fig. 6.1, tienen la misma longitud. Nuestra construcción asintótica de los frentes de onda cerca de las corrientes críticas J_1 y J_2 explotará la naturaleza de ondas viajeras de los frentes en movimiento.

Resolviendo numéricamente (6.2.5) se puede mostrar que, después de un breve transi-

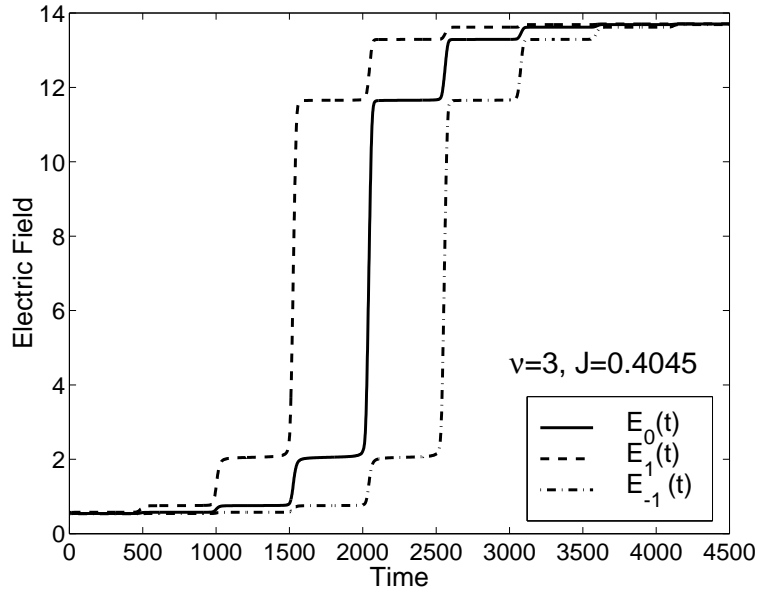


Figura 6.5: Perfil del campo eléctrico de un frente de onda en tres pozos consecutivos. El campo está representado en cada pozo en función del tiempo, que muestra como el frente se mueve con velocidad constante.

torio, una variedad de condiciones iniciales tales que $E_i \rightarrow E^{(1)}(J)$ cuando $i \rightarrow -\infty$ y $E_i \rightarrow E^{(3)}(J)$ cuando $i \rightarrow \infty$ evoluciona hacia un monopolio estacionario o en movimiento. La Fig. 6.2 es un plano de fase que muestra las regiones del plano (J, ν) donde los distintos frentes son estables.

Hay dos importantes valores de ν , $\nu_1 < \nu_2$, tales que:

- Para $0 < \nu < \nu_1$ y cualquier $J \in (v_m, 1)$ fijada, se han observado solo frentes de monopolos viajeros que se mueven en dirección de la corriente. Para $\nu > \nu_1$, se han encontrado solo monopolos estacionarios.
- Para $\nu_1 < \nu < \nu_2$, frentes viajeros que se mueven en dirección de la corriente existen solo si $J \in (v_m, J_1(\nu))$, donde $J_1(\nu) \in (v_m, 1)$ es el valor crítico de la corriente. $J_1(\nu)$ es una función monótona decreciente tal que $J_1 \rightarrow v_m$ cuando $\nu \rightarrow \infty$; ver Fig. 6.6.
- Para $\nu > \nu_2$ observamos nuevas soluciones. Como antes, tenemos frentes viajeros que se mueven en dirección de la corriente si $J \in (v_m, J_1(\nu))$ y monopolos estacionarios si $J \in (J_1(\nu), J_2(\nu))$, donde $J_2(\nu) < 1$ es una nueva corriente crítica, ver Fig. 6.6. La función $J_2(\nu)$ empieza en $J_2(\nu_2) = 1$, decrece hacia un único mínimo, y luego

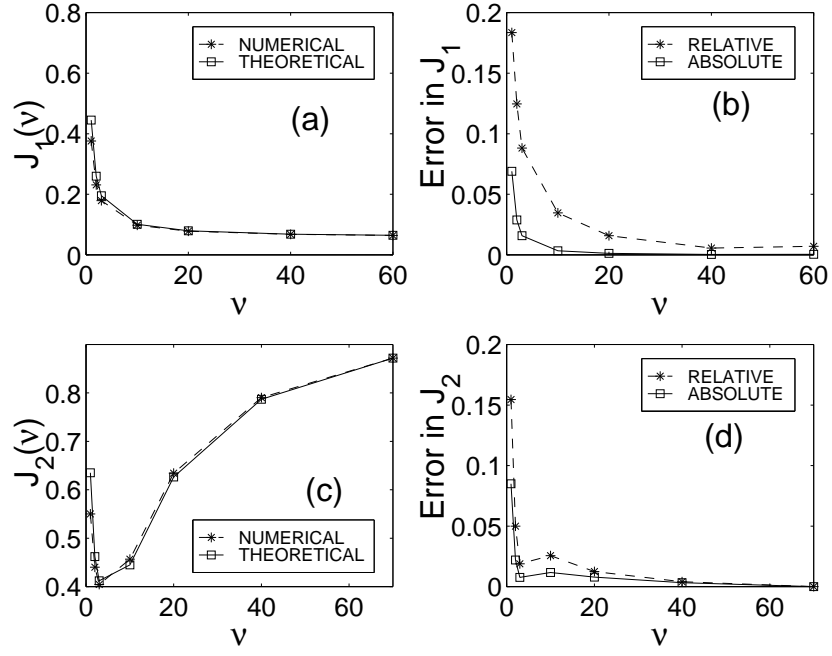


Figura 6.6: Corrientes críticas J_1 y J_2 en función del dopaje adimensional ν .

crece hacia 1 conforme $\nu \rightarrow \infty$. Para $J_2(\nu) < J < 1$, las soluciones estables de (6.4.1) y (6.4.2) son monopolos viajeros contracorriente (a la izquierda). Conforme ν va creciendo, $J_1(\nu)$ y $J_2(\nu)$ alcanzan v_m y 1, respectivamente. Entonces cuando ν es suficientemente grande las soluciones estacionarias se pueden encontrar para la mayoría de los valores de J .

La Fig. 6.7 muestra la velocidad de los frentes de onda en función de la corriente para $\nu = 3$, correspondiente al primer plateau de la superred 9/4. Para valores de ν más grandes, el intervalo de J donde existen soluciones estacionarias se vuelve mas grande otra vez, casi llenando todo $(v_m, 1)$ cuando $\nu \rightarrow \infty$. Para ν muy grande, las velocidades de los monopolos que se mueven en dirección de la corriente y contracorriente llegan a ser muy pequeñas en valor absoluto.

6.4. Anclaje de frentes de onda con un solo pozo activo

En las corrientes críticas, $J_1(\nu)$ y $J_2(\nu)$, los frentes de onda que se mueven en la dirección de la corriente (a la derecha, siguiendo el flujo de los electrones, con $c > 0$) para J pequeña y los que van contracorriente (a la izquierda, en contra del flujo de los electrones, con $c < 0$) para J más grande cesan de propagarse.

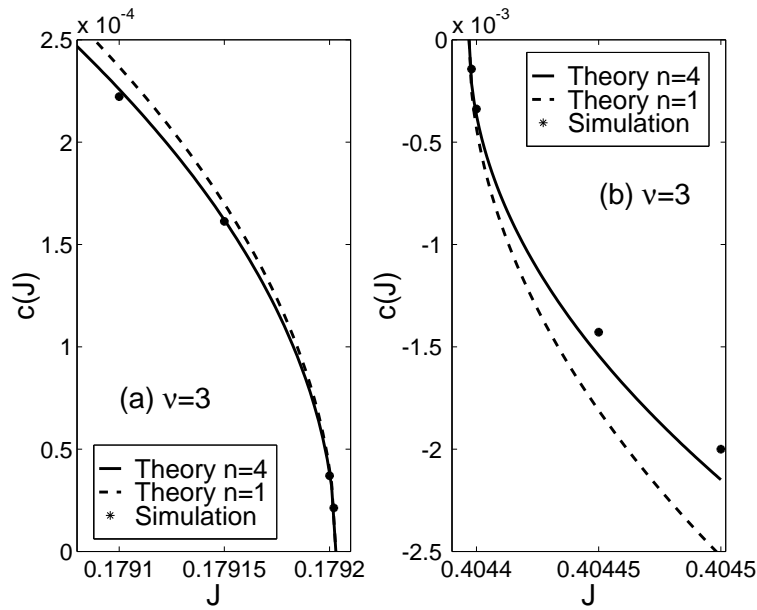


Figura 6.7: Velocidad del frente de onda en función de la densidad de corriente para $\nu = 3$. Hemos comparado la velocidad medida numéricamente con los resultados de nuestra teoría con uno o cuatro pozos activos.

Lo que pasa es que cuando J se acerca a los valores críticos el perfil del campo $E(\tau)$ se pone más y más empinado, hasta desarrollar los escalones de Fig. 6.1. De hecho, exactamente en J_k , $k = 1, 2$, se abren unos *gaps* en el perfil del frente de onda, que así pierde su continuidad. El perfil del campo eléctrico resultante es un frente estacionario $E_i = E_i(J, \nu)$: el frente de onda está anclado para $J_1 < J < J_2$. La transición de *depinning* de frentes estacionarios a frentes en movimiento es técnicamente una bifurcación silla-nodo. Vamos a estudiar primero el caso simple de dopaje adimensional ν grande, y luego veremos que pasa en el caso general.

Para dopaje suficientemente grande y J cerca de los valores críticos, el movimiento del frente está gobernado por el comportamiento de un solo pozo, que llamaremos *pozo activo*. Si miramos bien la forma de un frente estacionario cerca de las corrientes críticas, observamos que todos los pozos tienen campo eléctrico cerca de $E^{(1)}(J)$ ó $E^{(3)}(J)$ excepto un pozo que es arrastrado hasta eventualmente saltar: el pozo activo. Sea E_0 el valor del campo eléctrico en el pozo activo. Podemos reconstruir el perfil $E(i-ct)$ a partir de la evolución de $E_0(t) = E(-ct)$. Antes de que el pozo activo salte, $E_i \approx E^{(1)}(J)$ para $i < 0$ y $E_i \approx E^{(3)}(J)$

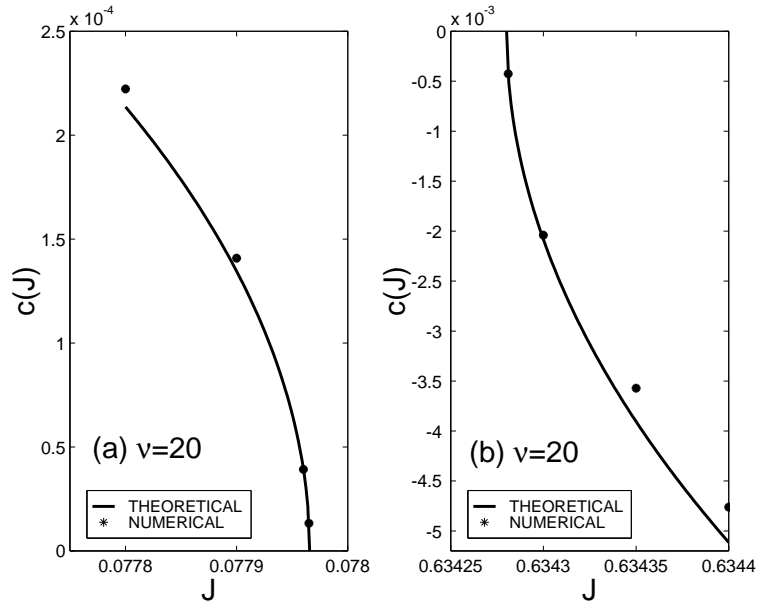


Figura 6.8: Velocidad del frente de onda en función de la densidad de corriente para $\nu = 20$. Hemos comparado la velocidad medida numéricamente con los resultados de nuestra teoría con un solo pozo activo.

para $i > 0$. Entonces (6.3.2) se vuelve en

$$\begin{aligned} \frac{dE_0}{dt} \approx & J - v(E_0) - v(E_0) \frac{E_0 - E^{(1)}}{\nu} \\ & + D(E_0) \frac{E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0}{\nu}. \end{aligned} \quad (6.4.1)$$

Como antes, esta ecuación tiene tres soluciones estacionarias para $J_1 < J < J_2$, dos estables y una inestable, y solo una estable de lo contrario. En las corrientes críticas, dos de estas soluciones se unen formando un nodo-silla. Para valores bajos de la corriente, las dos soluciones que se unen forman un doble cero correspondientes a un máximo de la parte derecha de (6.4.1). Para valores altos de J , las dos soluciones que se unen forman un doble cero correspondientes a un mínimo de la parte derecha de (6.4.1). Las corrientes críticas son tales que el desarrollo de (6.4.1) cerca de las dos soluciones estacionarias que se unen,

$$\begin{aligned} & J - v(E_0) - v(E_0) \frac{E_0 - E^{(1)}}{\nu} \\ & + D(E_0) \frac{E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0}{\nu} = 0, \end{aligned} \quad (6.4.2)$$

tiene termino lineal igual a cero,

$$\begin{aligned} D'_0(E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0) - 2D_0 \\ -v'_0(E_0 - E^{(1)}) - v_0 - \nu v'_0 = 0, \end{aligned} \quad (6.4.3)$$

donde $D'(0)$ quiere decir $D'(E_0)$, etc. Las últimas dos ecuaciones nos dan aproximaciones de E_0 y de la corriente crítica J_c (que puede ser J_1 ó J_2). Los resultados de nuestro análisis están en las Fig. 6.7 y 6.8 y muestran una excelente correspondencia con las simulaciones numérica del modelo para $\nu > 2$. Nuestra aproximación es peor para ν más pequeño, lo cual quiere decir que necesitamos más pozos activos para mejorarla.

Construimos ahora el perfil del frente de onda viajera después el *depinning*, para J poco menor de J_1 ó poco mayor de J_2 . Sea $E_0(J_c)$ la solución estacionaria de (6.4.1) para $J = J_c$. Poniendo $E_0(t) = E_0(J_c) + \varphi(t)$ para $J \rightarrow J_c$ y desarrollando hasta términos de orden $|J - J_c|$, (6.4.1) se convierte en

$$\frac{d\varphi}{dt} \approx \alpha (J - J_c) + \beta \varphi^2, \quad (6.4.4)$$

donde los coeficientes α y β están dados para

$$\alpha = 1 + \frac{v_0 + D_0}{\nu v'_1} + \frac{D_0}{\nu v'_3}, \quad (6.4.5)$$

$$\begin{aligned} 2\nu\beta = D''_0(E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0) - 4D'_0 - 2v'_0 \\ + v''_0(E^{(1)} - E_0 - 2\nu), \end{aligned} \quad (6.4.6)$$

$\beta < 0$ si $J_c = J_1$ y $\beta > 0$ si $J_c = J_2$.

La ecuación (6.4.4) tiene la solución (exterior)

$$\varphi(t) \sim (-1)^k \sqrt{\frac{(\alpha(J - J_k))}{\beta}} \tan\left(\sqrt{\alpha\beta(J - J_k)}(t - t_0)\right) \quad (6.4.7)$$

($k = 1, 2$), para J tal que $\text{sign}(J - J_k) = \text{sign}\beta$. La función φ es casi siempre muy pequeña y explota cuando el argumento de la función tangente llega a $\pm\pi/2$. Entonces la aproximación exterior vale sobre un intervalo de tiempo $(t - t_0) \sim \pi/\sqrt{\alpha\beta(J - J_k)}$. El recíproco de este intervalo de tiempo nos da una aproximación de la velocidad del frente de onda,

$$|c(J, \nu)| \sim \frac{\sqrt{\alpha\beta(J - J_k)}}{\pi}. \quad (6.4.8)$$

En las fig. 6.7 y 6.8 comparamos esta aproximación con la velocidad calculada numéricamente para $\nu = 3$ y $\nu = 20$, respectivamente.

Cuando la solución empieza a explotar, la solución exterior (6.4.7) deja de ser una buena aproximación por qué $E_0(t)$ se va del valor estacionario $E_0(J_c)$. Tenemos entonces que volver a (6.4.4) para obtener una aproximación interior para esta ecuación. Siendo J cerca

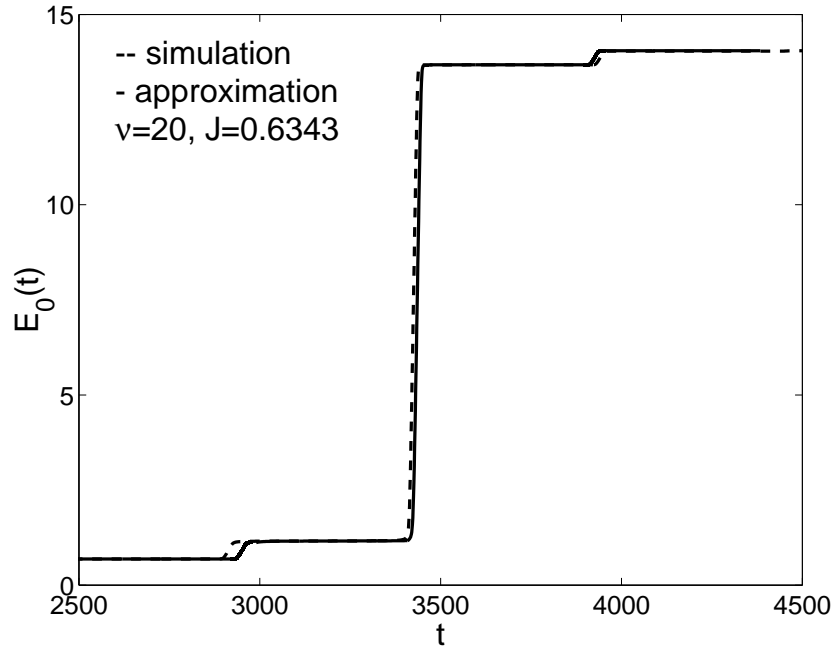


Figura 6.9: Perfil del frente de onda cerca de $J = J_2$ para $\nu = 20$. Hemos comparado los resultados del desarrollo asintótico con un sólo pozo activo con la solución numérica del modelo.

de J_c y $E_0(t) - E_0(J_c)$ de orden 1, resolvemos numéricamente (6.4.4) en $J = J_c$ con la condición de *matching* $E_0(t) - E_0(J_c) \sim (-1)^k 2 / [\pi \sqrt{\beta / [\alpha (J - J_c)]} - 2|\beta| (t - t_0)]$, para $(t - t_0) \rightarrow -\infty$.

Esta solución interior describe el salto de E_0 a valores cerca de $E^{(1)}$ si $J_c = J_1$, o a valores cerca de $E^{(3)}$ si $J_c = J_2$. Durante el salto, el movimiento de E_0 fuerza el movimiento de los otros puntos. Entonces, para $J_c = J_1$ podemos calcular $E_1(t)$ insertando la solución interior para E_0 en (6.2.5), con $J = J_c$ y $E_2 \approx E^{(3)}$. Análogamente, para $J_c = J_2$, podemos calcular $E_{-1}(t)$ usando la solución interior para E_0 en (6.2.5), con $J = J_c$ y $E_{-2} \approx E^{(1)}$. En la Fig. 6.9 comparamos el desarrollo construido con estas soluciones interior y exterior con la solución numérica del modelo. Nótese que hemos reconstruido los perfiles $E(i - ct)$ de las ondas viajeras a partir de la identidad $E_0(t) = E(-ct)$.

6.5. Anclaje de frentes de onda con más pozos activos

La descripción anterior de la transición de *depinning* empeora cuando ν decrece. De hecho vamos a necesitar más de un pozo activo para aproximar el movimiento del frente de onda, y el *depinning* se describe con un sistema reducido con más de un grado de libertad, correspondientes a los pozos activos. Aquí también tenemos una bifurcación silla-nodo

cuya forma normal es otra vez (6.4.4) con coeficientes diversos. Para encontrar el salto de los pozos activos vamos a resolver el sistema reducido con una condición de *matching*.

Pero: como determinamos el número de pozos activos optimal, es decir, ¿cuantos pozos necesitamos para una buena aproximación del salto? Para ν fijado, el autovector correspondiente al autovalor cero tiene un cierto número de componentes que son de orden 1, mientras los demás son muy pequeños. El número de componentes de magnitud 'normal' va a determinar el número optimal de pozos activos: sólo uno si $\nu > 10$, cuatro si $\nu = 3$, etc. El autovector del sistema reducido de ecuaciones para los pozos activos es una buena aproximación de los componentes más grandes del autovector correspondiente al sistema completo. Conforme nos vamos acercando al límite del continuo, más y más puntos entran en el sistema reducido de ecuaciones y ya este método no es adecuado para describir el modelo. Para este caso, en la próxima sección vamos a introducir un metodo alternativo. Como antes, el perfil del frente de onda cumple $E(i-ct) = E_i(t)$, donde $i = -L, \dots, M$ son los índices de los $A = L + M + 1$ pozos activos. Entonces suyas dinámicas reducidas cumplen (6.2.5) para $i = -L, \dots, M$ con las aproximaciones $E_{-L-1} \sim E^{(1)}$ y $E_{M+1} \sim E^{(3)}$. Tenemos que encontrar soluciones estacionarias aproximadas del sistema y luego linealizarlo respecto a las apropiadas. En la corriente crítica aproximada J_c , uno de los autovalores del sistema linealizado es cero. Llamamos U_i^\dagger y U_i los autovectores A -dimensionales izquierdo y derecho ($A = L + M + 1$) correspondientes al autovalor cero de la matriz de coeficientes para el sistema linealizado, escogidos de manera que $\sum_{i=-L}^M U_i^\dagger U_i = 1$. Muy cerca a J_c , el perfil del campo eléctrico va a ser $E_i(t) \sim E_i(J_c, \nu) + U_i \varphi(t)$ más términos que decrecen de manera exponencial respecto al tiempo. La función φ cumple (6.4.4) con los siguientes coeficientes:

$$\alpha = \sum_{i=-L}^M U_i^\dagger + \frac{v_0 + D_0}{\nu v'_{-L-1}} U_0^\dagger + \frac{D_M U_M^\dagger}{\nu v'_{M+1}}, \quad (6.5.1)$$

$$\begin{aligned} \beta = \frac{1}{2\nu} \sum_{i=-L}^M [D_i'' U_i^2 (E_{i+1} + E_{i-1} - 2E_i) \\ + 2D_i' U_i (U_{i+1} + U_{i-1} - 2U_i) - 2v_i' U_i (U_i - U_{i-1}) \\ + v_0'' (E_{i-1} - E_i - 2\nu) U_i^2] U_i^\dagger. \end{aligned} \quad (6.5.2)$$

Aquí hemos puesto $U_{-L-1} = U_{M+1} = 0$, $E_{-L-1} = E^{(1)}$, $E_{M+1} = E^{(3)}$, $v_i = v(E_i)$, $v_i' = v'(E_i)$, $D_i = D(E_i)$, etc. Todas las cantidades están evaluadas en $J = J_c$. Claramente estas fórmulas se convierten en (6.4.5) y (6.4.6) si $L = M = 0$, $U_0 = U_0^\dagger = 1$.

Obviamente, la solución y la interpretación de (6.4.4) es la misma de antes, solo tenemos que cambiar la condición de *matching* y la descripción del salto de los pozos activos. El aumento del número de pozos mejora considerablemente la aproximación de

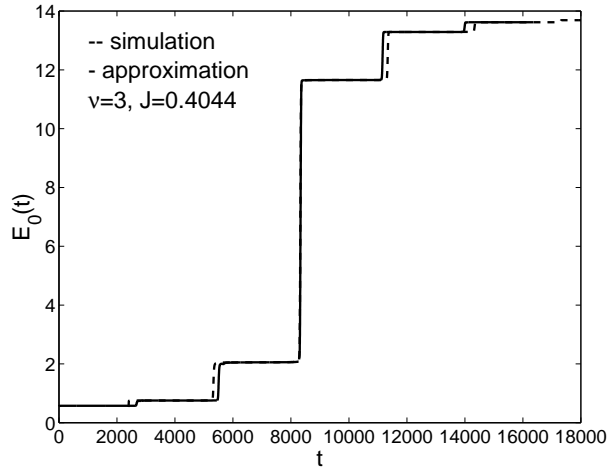


Figura 6.10: Perfil del frente de onda cerca de $J = J_2$ para $\nu = 3$. Hemos comparado los resultados del desarrollo asintótico con un sólo pozo activo con la solución numérica del modelo. Nótese que la mayor fuente de error es la estima teorica del período de tiempo (un error de 200 sobre un período de 3,000).

la velocidad del frente de onda: ver Fig. 6.7. El salto de los pozos activos se describe resolviendo la ecuación (6.2.5) para $i = -L, \dots, M$, con $J = J_c$, $E_i(t) = E_i(J_c, \nu) + U_i \varphi(t)$, y la misma condición de *matching* de antes. La Fig. 6.10 muestra una comparación entre la aproximación compuesta y la solución numérica del perfil del campo eléctrico para $\nu = 3$. Nótese la mejora respecto a la aproximación con un sólo pozo activo. Nuestra analisis muestra que la transición de frente en movimiento a frente estacionario implica pérdida de continuidad del perfil del frente de onda. Para el sistema reducido de pozos activos, la transición es una bifurcación silla-nodo global: dos soluciones estacionarias se unen en las corrientes críticas y (para $J < J_1(\nu)$ ó para $J > J_2(\nu)$) aparece un frente de onda viajera. Cerca de las corrientes críticas, el perfil de campo de este frente es muy empinado: se parece mucho a los típicos pasos discretos del perfil estacionario sobre largos intervalos de tiempo (que se rescalan como $|J - J_i|^{-\frac{1}{2}}$), seguidos de repentinas transiciones entre pasos. Aunque no tenemos una prueba, es natural conjeturar que la transición de *depinning* para el modelo completo es del mismo tipo de la transición para el sistema reducido de pozos activos.

Además, remarcamos que nuestra teoría de *depinning* de frentes se puede aplicar con pocas modificaciones al modelo más complicado que hemos presentado en el Cap. (3), en el sentido que allí la relación constitutiva para la densidad de corriente túnel $eJ_{i \rightarrow i+1}$ es más complicada de (6.2.1). La clave de nuestro razonamiento es que durante el *depinning* solo un número finito de pozos son activos para ν suficientemente grande.

6.6. El límite continuo

El límite continuo del modelo es útil para comprender las oscilaciones auto-sostenidas de la corriente y el movimiento del frente de onda. Consiste en suponer $\nu \rightarrow 0$, $i \rightarrow \infty$, con $\nu i = x \in [0, N\nu]$, $N\nu \gg 1$. En este límite, (6.2.5) se convierte en

$$\frac{\partial E}{\partial t} + v(E) \frac{\partial E}{\partial x} = J - v(E), \quad (6.6.1)$$

hasta términos de orden ν . La ecuación (6.6.1) corresponde al límite hiperbólico del bien conocido modelo de Kroemer para el efecto Gunn. Para J constante, las soluciones de estas ecuaciones son ondas de choque. Estas ondas están relacionadas con los frentes de onda, cuya velocidad puede ser calculada explícitamente.

De hecho, sea $V(E_+, E_-)$ la velocidad de una onda de choque tal que E se convierte en E_- (resp. E_+) a la izquierda (resp. derecha) del choque. Dentro de la onda de choque, tenemos que usar el modelo discreto con $n_i \gg 1$, $dE_i/dt \sim -V(E_i - E_{i-1})/\nu \gg 1$, y $J = O(1)$. Nótese que hemos rescalado la velocidad del frente de onda de manera que $V = c\nu$ es la velocidad correcta para el perfil continuo (rescalado) $E(x - Vt) = E(\nu(i - ct))$. Entonces

$$\begin{aligned} E_+ - E_- &= \sum (E_i - E_{i-1}) \sim \nu \sum n_i \\ &\sim V \sum \frac{E_i - E_{i-1}}{v(E_i) + D(E_i)} + \sum \frac{D(E_i)}{v(E_i) + D(E_i)} \nu n_{i+1} \\ &\sim V \sum \frac{E_i - E_{i-1}}{v(E_i) + D(E_i)} + \sum \frac{D(E_i)(E_{i+1} - E_i)}{v(E_i) + D(E_i)}. \end{aligned}$$

De lo cual se deduce

$$V \sim \frac{\sum \frac{v(E_i)(E_{i+1} - E_i)}{v(E_i) + D(E_i)}}{\sum \frac{E_i - E_{i-1}}{v(E_i) + D(E_i)}},$$

que se convierte en

$$V(E_+, E_-) = \frac{\int_{E_-}^{E_+} \frac{v(E)}{v(E) + D(E)} dE}{\int_{E_-}^{E_+} \frac{dE}{v(E) + D(E)}}, \quad (6.6.2)$$

en el límite continuo. Esta expresión es equivalente a la siguiente regla de áreas iguales ponderada (*weighted equal-area rule*)

$$\int_{E_-}^{E_+} \frac{v(E) - V(E_+, E_-)}{v(E) + D(E)} dE = 0. \quad (6.6.3)$$

Para $D = 0$, esta fórmula se reduce a la ya derivada para el modelo de convección discreto en [2]. En la Apéndice B vamos a dar una expresión que incluye una corrección a esta fórmula. Existe un solo valor de J , J^* , tal que $V = J$ con $E_- = E^{(1)}(J)$ y $E_+ = E^{(3)}(J)$. Para $J \in (v_m, J^*)$, un frente de onda que conecta $E^{(1)}(J)$ a $E^{(3)}(J)$ es un frente de onda

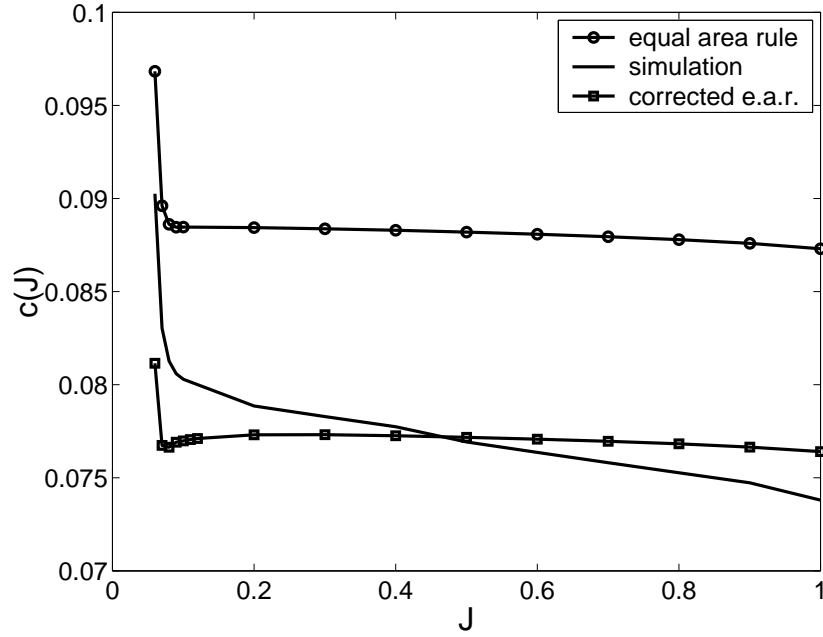


Figura 6.11: Comparación de las aproximaciones a la velocidad del frente de onda hechas con la regla de áreas iguales (al orden principal) y la regla de áreas iguales corregida (que incluye correcciones al primer orden) con la solución numérica del modelo para $\nu = 0,01$.

con $E_+ = E^{(3)}(J)$, y E_- tal que $V(E^{(3)}(J), E_-) = v(E_-)$. Además, a la izquierda de la onda de choque está una región de *cola* que se mueve rígidamente con el choque y tal que

$$[v(E) - V] \frac{\partial E}{\partial \xi} = J - v(E), \quad (6.6.4)$$

para $\xi = x - Vt$ negativo, y $E(-\infty) = E^{(1)}(J)$, $E(0) = E_-$. Toda esta estructura (regiones de choque y de cola) se llama un *monópolo con cola izquierda*, ver [9]. Análogamente, para $J \in (J^*, 1)$, un frente de onda que conecta $E^{(1)}(J)$ a $E^{(3)}(J)$ se llama *monópolo con cola derecha*. Este monopolo consiste en una onda de choque con $E_- = E^{(1)}(J)$, y E_+ tal que $V(E_+, E^{(1)}(J)) = v(E_+)$, y una región de cola que cumple (6.6.4) para ξ positivo, con las condiciones de contorno $E(0) = E_+$ y $E(\infty) = E^{(3)}(J)$, ver [9]. En conclusión, la velocidad del frente de onda como función de J está determinada por las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} C(J) &= V(E^{(3)}(J), E_-), \text{ con} \\ v(E_-) &= V(E^{(3)}(J), E_-), \text{ si } v_m < J < J^*, \end{aligned} \quad (6.6.5)$$

$$\begin{aligned} C(J) &= V(E_+, E^{(1)}(J)), \text{ con} \\ v(E_+) &= V(E_+, E^{(1)}(J)), \text{ si } J^* < J < 1. \end{aligned} \quad (6.6.6)$$

Nótese que $C(J)$ es el valor límite de la velocidad del frente de onda rescalada, $c(J, \nu)\nu$, para $\nu \rightarrow 0+$. Hemos comparado la aproximación continua de la velocidad del frente de

onda (en pozos cruzados por unidad de tiempo, i.e., $c(J, \nu) = C(J)/\nu$, non rescalada) con la solución numérica del modelo para $\nu = 0,01$ en Fig. (6.11). La regla de áreas iguales corresponde a (6.6.2), (6.6.5) y (6.6.6) y su diferencia máxima con la solución numérica es acerca de 17.6 %. La corrección en la Apéndice B mejora mucho el resultado: esta vez la diferencia máxima es como máximo 3 % de la solución numérica.

6.7. Conclusiones

En este Capítulo hemos analizado el movimiento de frentes de onda en modelos discretos de convección-difusión de transporte de carga no lineal en superredes semiconductoras. Los frentes en movimiento son perfiles del campo eléctrico que se mueven rígidamente con velocidad constante. La falta de propagación de los frentes es debida a la pérdida de continuidad del perfil del campo que se ancla cuando la densidad de corriente J llega a las corrientes críticas. Hemos caracterizado la falta de propagación de los frentes de onda y , al contrario, el *depinning* de los frentes con métodos de perturbaciones singulares. Estos métodos se basan en el hecho que solo unos pocos pozos activos toman parte al movimiento de los frentes de onda, para dopaje adimensional ν suficientemente grande. En el límite continuo, cuando ν tiende a cero, más y más pozos se ponen activos y tiene sentido una distinta aproximación. En este límite, las ecuaciones discretas se convierten en ecuaciones diferenciales y los frentes de onda en ondas de choque con una región de cola rígida a su izquierda ó su derecha. Hemos obtenido una regla de igualdad de áreas para estas ondas de choque, y también su corrección al primer orden. Las nuestras teorías asintóticas funcionan bien en sus respectivos campos de validez y aproximan el movimiento de un frente de onda bajo corriente constante en una superred infinita.

La comprensión de este movimiento es la clave para entender mejor fenomenos más complejos que pueden pasar en superredes semiconductoras bajo condiciones de voltaje constante.

Capítulo 7

Conclusiones y problemas abiertos

En este capítulo hacemos un resumen de los resultados encontrados, las conclusiones generales de la tesis y una descripción de los problemas abiertos que consideramos más interesantes. En términos generales, nuestro trabajo ha consistido en un estudio exhaustivo de un modelo de convección–difusión para superredes semiconductoras débilmente acopladas a nivel numérico, asintótico y de estabilidad, lineal y no lineal. En ese estudio hemos utilizado una formulación para la densidad de corriente túnel que no había sido empleada en trabajos anteriores y con el auxilio de métodos numéricos extremadamente precisos hemos encontrado resultados antes desconocidos. Hemos investigado la relocación de los dominios del campo eléctrico en los procesos de *sweeping* del voltaje y encontrado escenarios inusuales. Luego, hemos investigado el mismo modelo a corriente constante y encontrado propiedades estrictamente dependientes de la discreteza de nuestro sistema, introduciendo la noción de *pozo activo*.

A continuación presentamos las conclusiones generales que se deducen de los estudios mencionados antes, repasando los resultados obtenidos en cada capítulo.

Después introducir unos conceptos generales y el modelo, en el Capítulo 4 hemos estudiado los estados estacionarios del modelo de convección–difusión y su estabilidad lineal. De ese estudio, hemos deducido la aparición de puntos de bifurcación de Hopf cerca de las extremidades de las ramas estacionarias, y hemos encontrado, via un desarrollo en escalas múltiples, la ecuación de amplitud de nuestro sistema.

En el Capítulo 5 hemos hecho la resolución numérica del modelo y de la dinámica de relocación de los dominios del campo eléctrico debida a *sweeping* del voltaje. El análisis de la estabilidad lineal nos sirvió para interpretar los resultados, de los cuales lo más destacado es la dependencia del tiempo de ramping de la configuración final del sistema, o sea esa configuración no depende solo del voltaje final sino también de como hemos llegado a ese voltaje, con que tiempo de ramping.

Finalmente, en el Capítulo 6 estudiamos el mismo modelo pero a corriente constante y encontramos resultados que desvelan la naturaleza intrínsecamente discreta de nuestro sistema: anclaje de frentes de onda, posibilidad de describir la dinámica con el auxilio de sólo unos *pozos activos*, movimiento contracorriente del frente.

Problemas abiertos y problemas pendientes de resolución

La continuación natural del trabajo expuesto en esta tesis consiste en resolver numéricamente las ecuaciones que determinan la ecuación de amplitud en el Capítulo 4 y así encontrar el punto exacto de la bifurcación de Hopf. Además, sería oportuno un estudio del diagrama de bifurcación con el auxilio del programa AUTO, visto el gran número de parámetros involucrados en el sistema. Así como sería interesante encontrar numéricamente las eventuales bifurcaciones de Hopf que dependen del tiempo de ramping (y cuyos indicios se han encontrado numéricamente).

Desde el punto de vista físico, sería interesante averiguar experimentalmente las predicciones hechas en la presente tesis, como la existencia del valor crítico del tiempo de ramping antes del cual se empiezan a saltar ramas de la curva característica I-V.

Desde el punto de vista matemático, el principal interés consiste en extraer la esencia del modelo de transporte que provoca los fenómenos no lineales observados, especialmente los dependientes del tiempo de ramping. Otro asunto que merecería la pena estudiar es como varían los escenarios de relocación si en lugar de un crecimiento lineal del voltaje con el tiempo escogemos un crecimiento no lineal, hasta oscilatorio.

Apéndice A

Velocidad de convección y coeficiente de difusión

Para comparar los resultados teóricos con la solución numerica del modelo, es mejor usar aproximaciones analíticas de la velocidad de arrastre de los electrones y de la difusividad en lugar de usar datos numéricos. Usamos los siguientes coeficientes adimensionales, que aproximan los que han sido usados en [13]:

$$\begin{aligned} v(E) &= \frac{0,2684 E}{0,25 + (0,9862E - 0,85)^2} \\ &+ \frac{0,9072}{0,16 + (0,9862E - 15)^2} - 0,004, \end{aligned} \tag{A.0.1}$$

$$D(E) = 2 e^{-E^2}. \tag{A.0.2}$$

La función velocidad tiene un máximo local en $E = 1$, $v = 1$.

Apéndice B

Corrección del primer orden a la regla de áreas iguales

Una derivación más cuidadosa de la regla de igualdad de áreas tiene en cuenta la regla del trapecio para integrales de Riemann:

$$\begin{aligned}\int_{E_-}^{E_+} f(E) dE &\approx \sum f(E_i) (E_i - E_{i-1}) \\ &- \frac{1}{2} \sum [f(E_i) - f(E_{i-1})] (E_i - E_{i-1}) \\ &\approx \sum f(E_{i-1}) (E_i - E_{i-1}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum [f(E_i) - f(E_{i-1})] (E_i - E_{i-1}).\end{aligned}\tag{B.0.1}$$

Podemos repetir cuanto hecho en la Sección (6.6), teniendo ahora en cuenta el término (B.0.1) cuando sustituimos integrales con sumas de Riemann. El resultado es

$$V(E_+, E_-) = \frac{\int_{E_-}^{E_+} \frac{v(E)}{v(E)+D(E)} dE + S_N}{\int_{E_-}^{E_+} \frac{dE}{v(E)+D(E)} + S_D},\tag{B.0.2}$$

$$\begin{aligned}S_N &= \frac{1}{2} \sum \left(\frac{D_i}{v_i + D_i} - \frac{D_{i-1}}{v_{i-1} + D_{i-1}} \right) (E_i - E_{i-1}) \\ &= -\frac{1}{2} \sum \left(\frac{v_i}{v_i + D_i} - \frac{v_{i-1}}{v_{i-1} + D_{i-1}} \right) (E_i - E_{i-1}),\end{aligned}\tag{B.0.3}$$

$$S_D = \frac{1}{2} \sum \left(\frac{1}{v_i + D_i} - \frac{1}{v_{i-1} + D_{i-1}} \right) (E_i - E_{i-1}).\tag{B.0.4}$$

Bibliografía

- [1] **A. Amann, A. Wacker, L. L. Bonilla, y E. Schöll**
Dynamic scenarios of multistable switching in semiconductor superlattices
Phys. Rev. E, **63**, 066207 (2001)
- [2] **L. L. Bonilla**
Dynamics of electric field domains in superlattices
en *Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors and Devices*
Ed. F.-J. Niedernostheide, Vol. 79 of *Springer Proceedings in Physics*, 1-19 (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1995).
- [3] **L. L. Bonilla, I. R. Cantalpiedra, G. Gomila y M. Rubí**
Asymptotic analysis of the Gunn effect with realistic boundary conditions
Physical Review E, **56**, 1500-1510 (1997)
- [4] **L. L. Bonilla**
Theory of nonlinear charge transport, wave propagation and self-oscillations in semiconductor superlattices
J. Physics: Condensed matter **14**, 341 (2002)
- [5] **L.L. Bonilla, R. Escobedo y G. Dell'Acqua**
Voltage switching and domain relocation in semiconductor superlattices
Phys. Rev. B, **73**, 115341 (2006)
- [6] **L. L. Bonilla, J. Galan, J. A. Cuesta, F. C. Martínez y J. M. Molera**
Dynamics of electric-field domains and oscillation of the photocurrent in a simple superlattice model
Phys. Rev. B, **50**, 8644 (1994)
- [7] **L. L. Bonilla, H. T. Grahn**
Non-linear dynamics of semiconductor superlattices
Rep. Prog. Phys. **68**, 577-683 (2005)

- [8] **L. L. Bonilla, F. J. Higuera**
The onset and end of the Gunn effect in extrinsic semiconductors
 SIAM J. Appl. Math. **55** (6), 1625-1649 (1995)
- [9] **L. L. Bonilla, M. Kindelan, M. Moscoso, S. Venakides**
Periodic Generation and Propagation of Traveling Fronts in DC Voltage Biased Semiconductors Superlattices
 SIAM J. Appl. Math. **57** (6), 1588-1614 (1997)
- [10] **L. L. Bonilla, G. Platero y D. Sanchez**
Microscopic derivation of transport coefficients and boundary conditions in discrete drift-diffusion models of weakly coupled superlattices
 Physical Review B, **62**, 2786 (2000)
- [11] **A. Carpio, L. L. Bonilla**
Wave front depinning transition in discrete one-dimensional reaction-diffusion systems
 Phys. Rev. Lett. **86**, 6034 (2001)
- [12] **A. Carpio, L. L. Bonilla y G. Dell'Acqua**
Motion of Wavefronts in semiconductor superlattices
 Phys. Rev. E **64** 036204 (2001)
- [13] **A. Carpio, L. L. Bonilla, A. Wacker y E. Schöll**
Wave front may move upstream in semiconductor superlattices
 Phys. Rev. E **61** 4866-4876 (2000)
- [14] **A. Carpio, S. J. Chapman, S. Hastings, J.B. McLeod**
Wave solutions for a discrete reaction-diffusion equation
 Eur. J. Appl. Math. **11** 399-412 (2000)
- [15] **F. Capasso, K. Mohammed y A.Y. Cho**
Sequential Resonant Tunneling through a multiquantum well superlattice
 Applied Physics Letters, **48**, 478 (1986)
- [16] **G. Dell'Acqua, L. L. Bonilla y R. Escobedo**
Relocation dynamics and multistable switching in semiconductor superlattices
 J. Comput. Appl. Math. (publicado electronicamente) (2006);
- [17] **L. Esaki y L. L. Chang**
New transport phenomena in a semiconductor "superlattice"
 Phys. Rev. Lett. **33**, 495 (1974)

- [18] **L. Esaki y R. Tsu**
Superlattices and negative differential conductivity in semiconductors
 IBM J. Res. Develop. **4**, 61 (1970)
- [19] **R. Escobedo**
Estudio numérico y asintótico del efecto Gunn en varias dimensiones descrito por el modelo de Kroemer de convección-difusión
 Tesis Doctoral. Departamento de Matemáticas. Universidad Carlos III de Madrid (2001)
- [20] **M. Kindelan, L.L. Bonilla, F. J. Higuera**
Onset of the Gunn Effect in Semiconductors: Bifurcation Analysis and Numerical Simulations
 ZAMM. Z. angew. Math. Mech. **76** (1996) S2 pp 575-576
- [21] **J. Kastrup, R. Hey, K. H. Ploog, H. T. Grahn, L. L. Bonilla, M. Kindelan, M. Moscoso, A. Wacker, y J. Galán**
Electrically tunable GHz oscillations in doped GaAs-AlAs superlattices
 Phys. Rev. B, **55**, 2476 (1997)
- [22] **J. Kastrup, R. Klahn, H. T. Grahn, K. H. Ploog, L. L. Bonilla, J. Galán, M. Kindelan, M. Moscoso y R. Merlin**
Self-oscillations of domains in doped GaAs-AlAs superlattices
 Phys. Rev. B, **51**, 13761 (1995)
- [23] **M. Moscoso**
Estructuras espacio-temporales en superredes semiconductoras dopadas
 Tesis Doctoral. Departamento de Matemáticas. Universidad Carlos III de Madrid (1997)
- [24] **M. Moscoso, J. Galan y L. L. Bonilla**
Bifurcation behavior of a superlattice model
 SIAM J. Appl. Math. **60** (6), 2029-2057 (2000)
- [25] **A. Perales**
Dinámica electronica en superredes semiconductoras
 Tesis Doctoral. Departamento de Matemáticas. Universidad Carlos III de Madrid (2003)
- [26] **M. Rogozia, S. W. Teitworth, H. T. Grahn y K. H. Ploog**
Statistics of the domain-boundary relocation time in semiconductor superlattices
 Phys. Rev. B, **64**, R041308 (2001)

- [27] **M. Rogozia, S. W. Teitsworth, H. T. Grahn y K. H. Ploog**
Relocation dynamics of domain boundaries in semiconductor superlattices
Phys. Rev. B, **65**, 205303 (2002)

- [28] **M. Rogozia, S. W. Teitsworth, H. T. Grahn y K. H. Ploog**
Time distribution of the domain-boundary relocation in superlattices
Phys. B, **314**, 427-430 (2002)